UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE FILOSOFIA, CIÊNCIAS E LETRAS DE RIBEIRÃO PRETO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA À MEDICINA E BIOLOGIA

**Difusão Anômala: Transição entre os Regimes
Localizado e Estendido na Caminhada do Turista
Unidimensional
(Versão Corrigida)**

Rodrigo Silva González

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada à Medicina e Biologia da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física Aplicada à Medicina e Biologia.

Orientador: Prof. Dr. Alexandre Souto Martinez

Ribeirão Preto, Agosto de 2006.

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE DOCUMENTO, POR MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

González, R. S.

Difusão Anômala: Transição entre os Regimes Localizado e Estendido na Caminhada do Turista Unidimensional

(Versão Corrigida)/ Rodrigo Silva González; orientador Prof. Dr. Alexandre Souto Martinez.

– Ribeirão Preto/SP, 2006.

118 f.

Dissertação (Mestrado – Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada à Medicina e Biologia) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo.

Palavras Chaves: caminhada determinista, caminhada do turista, meios aleatórios, percolação, difusão anômala.

Banca Examinadora:

Aos meus pais, Cícero e Esther, que sempre me incentivaram a perseguir meus objetivos.

À minha querida companheira Cleusa, pelo apoio incondicional e pela paciência.

*Aos caros mestres Antonio Luiz Menegucci e Milton Mitomi Ueda, que me mostraram a
beleza das ciências exatas.*

Agradecimentos

Meus mais profundos agradecimentos ao meu orientador, Prof. Dr. Alexandre Souto Martinez, que me guiou desde meus primeiros passos na área da Física Estatística e sob cuja orientação venho trabalhando desde a Iniciação Científica. Sua motivação, seu incentivo e sua dedicação foram essenciais para o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço também aos meus colegas do grupo de Física Estatística: Wilnice Tavares Reis Oliveira, Marcelo Alves Pereira, Mônica Guimarães Campiteli e Felipe de Moura Kiipper, pela oportunidade de troca de experiências e de conhecimento. Em especial, quero agradecer ao colega doutorando César Augusto Sangalleti Terçariol, que sugeriu algumas correções no manuscrito desta Dissertação.

Agradeço aos Professores Doutores:

- Carlos Frederico de Oliveira Graeff,
- Draulio Barros de Araújo,
- José Augusto Baranauskas,
- Nelson Augusto Alves,
- Osame Kinouchi Filho,
- Oswaldo Baffa Filho,
- Renato Tinós e
- Ubiraci Pereira da Costa Neves,

pela prestatividade e pelo empenho demonstrados durante as disciplinas que cursei.

Finalmente, estes agradecimentos não estariam completos sem a menção à minha querida companheira, Cleusa, cujo apoio incondicional foi fundamental para a concretização deste trabalho.

*"Caminante, son tus huellas
el camino y nada más;
Caminante, no hay camino,
se hace camino al andar."*

Antonio Machado

Resumo

Considere um meio desordenado formado por N pontos cujas coordenadas são geradas aleatoriamente com probabilidade uniforme ao longo das arestas unitárias de um hipercubo de d dimensões. Um caminhante, partindo de um ponto qualquer desse meio, se desloca seguindo a regra determinista de dirigir-se sempre ao ponto mais próximo que não tenha sido visitado nos últimos μ passos. Esta dinâmica de movimentação, denominada caminhada determinista do turista, leva a trajetórias formadas por uma parte inicial transiente de t pontos, e uma parte final cíclica de p pontos. A exploração do meio se limita aos $t + p$ pontos percorridos na trajetória. O sucesso da exploração depende do valor da memória μ do viajante. Para valores pequenos de μ a exploração é altamente localizada e o sistema não é satisfatoriamente explorado. Já para μ da ordem de N , aparecem ciclos longos, permitindo a exploração global do meio. O objetivo deste estudo é determinar o valor de memória μ_1 para o qual ocorre uma transição abrupta no comportamento exploratório do turista em meios unidimensionais. Procuramos também entender a distribuição da posição final do turista após atingir um estado estacionário que é atingido quando o turista fica aprisionado nos ciclos. Os resultados obtidos por simulações numéricas e por um tratamento analítico mostram que $\mu_1 = \log_2 N$. O estudo também mostrou a existência de uma região de transição com largura $\varepsilon = e/\ln 2$ constante, caracterizando uma transição aguda de fase no comportamento exploratório do turista em uma dimensão. A análise do estado estacionário da caminhada em função da memória mostrou que, para μ distante de μ_1 , a dinâmica de exploração ocorre como um processo difusivo tradicional (distribuição gaussiana). Já para μ próximo de μ_1 (região de transição), essa dinâmica segue um processo superdifusivo não-linear, caracterizado por distribuições q -gaussianas e distribuições α -estáveis de Lévy. Neste processo, o parâmetro q funciona como parâmetro de ordem da transição.

Palavras Chaves: caminhada determinista, caminhada do turista, meios aleatórios, percolação, difusão anômala.

Abstract

Consider a disordered medium formed by N point whose coordinates are randomly generated with uniform probability along the unitary edges of a d -dimensional hypercube. A walker, starting to walk from any point of that medium, moves following the deterministic rule of always going to the nearest point that has not been visited in the last μ steps. This dynamic of moving, called deterministic tourist walk, leads to trajectories formed by a initial transient part of t points and a final cycle of p points. The exploration of the medium is limited to the $t + p$ points covered. The success of the exploration depends on the traveler's memory value μ . For small values of μ , the exploration is highly localized and the whole system remains unexplored. For values of μ of the order of N , however, long cycles appear, allowing global exploration of the medium. The objective of this study is to determine the memory value μ_1 for which a sharp transition in the exploratory behavior of the tourist in one-dimensional media occurs. We also want to understand the distribution of the final position of the tourist after reaches a steady state in exploring the medium. That steady state is reached when the tourist is trapped in cycles. The results achieved by numerical simulations and analytical treatment has shown that $\mu_1 = \log_2 N$. The study has also shown the existence of a transition region, with a constant width of $\varepsilon = e/\ln 2$, characterizing a phase transition in the exploratory behavior of the tourist in one dimension. The analysis of the walk steady state as a function of the memory has shown that for μ far from μ_1 , the exploratory dynamic follows a traditional diffusion process (with gaussian distribution). In the other hand, for μ near μ_1 (transition region), the dynamic follows a non-linear superdiffusion process, characterized by q -gaussian distributions and Lèvy α -stable distributions. In this process, the parameter q plays the role of a transition order parameter.

Keywords: deterministic walk, tourist walk, random media, percolation, anomalous diffusion.

Sumário

Lista de Siglas	p. 19
Lista de Símbolos	p. 21
Lista de Figuras	p. 23
1 Introdução	p. 27
2 Fenômenos de Transporte Normais e Anômalos	p. 31
2.1 Difusão Tradicional	p. 31
2.2 Caminhada Aleatória	p. 34
2.2.1 A caminhada aleatória de Pearson	p. 34
2.2.2 Caminhada aleatória como modelo de difusão	p. 34
2.2.3 Limite gaussiano da caminhada aleatória	p. 36
2.3 Difusão Anômala	p. 38
2.3.1 Equação de Difusão Não-Linear	p. 40
2.3.2 Equação de Difusão de Lévy-Gnedenko	p. 41
2.4 Conclusão	p. 43
3 Aspectos Gerais da Caminhada Determinista do Turista	p. 45
3.1 Meio Desordenado	p. 46
3.1.1 Probabilidade de Vizinhança em Ambientes Poissônicos: Fórmula de Cox	p. 47
3.1.2 Efeito de Borda	p. 48

3.1.3	Condições de Contorno	p. 49
3.1.4	Sistemas de Dimensionalidades Diferentes	p. 50
3.2	Caminhada Determinista do Turista	p. 51
3.2.1	A Tabela de Vizinhaça	p. 52
3.2.2	Visualização das Caminhadas em Uma, Duas e Três Dimensões	p. 53
3.2.3	O Grafo do Turista	p. 54
3.2.4	Turista Preguiçoso	p. 55
3.2.5	Turista sem Memória	p. 56
3.2.6	Turista com Memória	p. 57
3.3	Modelos de Campo Médio	p. 58
3.3.1	Modelo de Distâncias Aleatórias	p. 58
3.3.2	Modelo de Mapeamento Aleatório	p. 59
3.4	Conclusão	p. 60
4	Transição de Percolação em Sistemas Unidimensionais	p. 61
4.1	Meio Desordenado	p. 61
4.2	Transição de Percolação	p. 62
4.3	Caminhada do Turista em Sistemas Unidimensionais	p. 64
4.4	Algoritmo Numérico	p. 65
4.5	Transmissão na Caminhada do Turista Unidimensional	p. 66
4.6	Dedução Analítica do Índice de Transmissão em Função da Memória	p. 68
4.7	Determinação da Memória Crítica de Transmissão	p. 70
4.8	Conclusão	p. 73
5	Difusão Anômala na Caminhada Determinista do Turista	p. 75
5.1	Algoritmo Numérico	p. 75
5.2	Ajuste dos Dados Numéricos ao Modelo de Difusão Anômala	p. 77

5.3	Conclusão	p. 81
6	Considerações Finais	p. 83
6.1	Escolha do Software	p. 83
6.2	Configuração do Equipamento	p. 84
6.3	Os Códigos das Simulações Numéricas	p. 85
6.4	Gerenciamento de Memória e Tempo de Execução	p. 86
6.5	Conclusão	p. 87
7	Conclusões	p. 89
	Apêndice A – Funções Especiais	p. 93
A.1	Transformada de Fourier	p. 93
A.2	Função Delta de Dirac	p. 94
A.2.1	Aplicação da Função Delta ao Cálculo de Integrais Definidas . .	p. 94
A.2.2	Função Delta como Transformada de Fourier	p. 94
A.2.3	Função Delta como Limite de uma Gaussiana	p. 95
A.2.4	Função Delta como Limite de uma Distribuição de Cauchy (Lau- rentziana)	p. 95
A.3	Função Gama	p. 96
A.4	Função Beta	p. 96
A.5	Função Exponencial Generalizada	p. 97
	Apêndice B – Resumo: Teoria de Distribuições de Probabilidades	p. 99
B.1	Variáveis Aleatórias	p. 99
B.1.1	Variáveis Aleatórias Discretas	p. 99
B.1.2	Variáveis Aleatórias Contínuas	p. 100
B.2	Momentos de uma Distribuição	p. 101
B.3	Função Característica	p. 101

B.4	Distribuição Conjunta de Variáveis Aleatórias Multidimensionais	p. 102
B.5	Distribuição Marginal e Condicional	p. 102
B.6	Distribuição do Produto e da Soma de Variáveis Aleatórias	p. 103
B.7	Teorema do Limite Central de Gauss	p. 104
B.8	Teorema do Limite Central de Lévy-Gnedenko	p. 105
B.8.1	Distribuição Estável	p. 105
B.8.2	Teorema do Limite Central Generalizado	p. 105

Apêndice C – Estimativa de Parâmetros pelos Métodos de Máxima Verossimilhança e Mínimos Quadrados

		p. 107
C.1	Introdução	p. 107
C.2	O Método de Máxima Verossimilhança	p. 109
C.3	Aplicação do Método de Máxima Verossimilhança a Uma Distribuição Exponencial	p. 110
C.4	Aplicação do Método de Máxima Verossimilhança a Uma Distribuição Gaussiana	p. 111
C.5	Propriedades dos Estimadores de Máxima Verossimilhança	p. 112
C.6	O Método de Mínimos Quadrados	p. 113

Referências		p. 115
--------------------	--	--------

Lista de Siglas

DFM Departamento de Física e Matemática

FAMB Física Aplicada à Medicina e Biologia

FFCLRP Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto

USP Universidade de São Paulo

pdf Função de Densidade de Probabilidade (Probability Density Function)

v.a. Variável Aleatória

i.i.d. independentes e identicamente distribuídas

Lista de Símbolos

N Número de pontos do meio

d Dimensionalidade do meio

μ Memória do turista

μ_d Memória crítica, na qual ocorre uma transição de fase de percolação na caminhada do turista

$\hat{D}$ Matriz de distâncias

$\hat{D}_{i,j}$ Distância entre os sítios i e j

$D_{i,j}$ Distância escalonada entre os sítios i e j

V Tabela de vizinhança

$S_{\mu,d}(t)$ Distribuição de probabilidade do tempo de transiente t em um sistema de d dimensões com memória μ

$D_{\mu,d}(p)$ Densidade de ciclos de período p em sistemas de d dimensões com memória μ

Lista de Figuras

- 1 Representação geométrica das vizinhanças para $d = 2$. J é o n -ésimo vizinho de seu próprio m -ésimo vizinho I p. 47
- 2 Variação de P_d (Eq. 3.3) em função do número de dimensões do sistema. p. 48
- 3 Crescimento relativo da periferia de um sistema em função do aumento da dimensionalidade (Eq. 3.4). Observe que para $d \geq 10$ os efeitos de borda são dominantes. p. 49
- 4 Condições abertas e periódicas de contorno em 1 dimensão. p. 50
- 5 Condições abertas e periódicas de contorno em 2 dimensões. p. 50
- 6 Esquema de detecção de ciclos na caminhada do turista pelo método de janela deslizante para $\mu = 4$. Neste caso temos um transiente de três passos e um período p p. 53
- 7 Interface gráfica desenvolvida para visualização das caminhadas com $N = 15$ e $\mu = 4$ em (a) uma e (b) duas dimensões. Os ciclos aparecem em destaque. Observe que os parâmetros “Número de cidades”, “dimensionalidade”, “memória” e “semente” do gerador de números aleatórios são fornecidos ao programa no canto superior direito. Abaixo apresentam-se várias opções de visualização, na linha inferior tem-se a trajetória e canto inferior direito são mostrados o tamanho do ciclo detectado e a posição do cursor. p. 54
- 8 Interface gráfica mostrando a mesma caminhada em um espaço tridimensional sob dois pontos de vista diferentes. O ciclo aparece em destaque. p. 54
- 9 Densidade de casais em função da dimensionalidade do sistema. p. 57
- 10 Meio desordenado bidimensional formado por ligações aleatórias em uma rede homogênea de 40×40 pontos com (a) $p = 0,25$ e (b) $p = 0,50$. As linhas indicam as ligações abertas. p. 61

- 11 Meio desordenado bidimensional formado por ocupações aleatórias dos sítios de uma rede homogênea de 40×40 pontos com (a) $p = 0,25$ e (b) $p = 0,50$. As células escuras indicam os sítios ocupados. p. 62
- 12 Variação da probabilidade de percolação $\theta(p)$ em função de p . O ponto p_c indica a probabilidade crítica, onde ocorre a transição de fase. p. 64
- 13 As três possibilidades de trajetória na caminhada do turista em um sistema unidimensional: (a) reflexão, (b) absorção e (c) transmissão. p. 65
- 14 Variação dos índices de reflexão (círculos), absorção (triângulos) e transmissão (quadrados) para a caminhada do turista em sistemas unidimensionais em função de μ . Estas curvas foram obtidas para $M = 10000$ mapas com $N = 1000$ pontos. p. 68
- 15 Meio desordenado unidimensional semi-infinito. p. 68
- 16 Variação do índice de transmissão da caminhada do turista unidimensional sobre $M = 10000$ mapas com $N = 10$ (círculos), 100 (quadrados) e 1000 (triângulos) pontos. As linhas contínuas mostram os resultados analíticos obtidos pela Eq. 4.6. p. 70
- 17 (a) Variação do índice de transmissão da caminhada do turista unidimensional em função de N e de μ . (b) Visão superior, mostrando a transição entre os regimes localizado (região escura) e estendido (região clara) da caminhada unidimensional do turista. É interessante notar que a largura da região de transição é constante em função de N . A linha no alto à esquerda indica o limite de $\mu = N$. Os índices foram calculados sobre $M = 100000$ mapas com N variando de 10 a 10000 pontos e μ de 0 a 20. p. 70
- 18 Valores de μ_1 em função de N obtidos por interpolação linear dos dados numéricos. A linha contínua representa a Eq. 4.9. p. 71
- 19 Esquema para a determinação da largura ε da região de transição no índice de transmissão da caminhada do turista unidimensional. p. 72
- 20 Distribuição da posição final da caminhada unidimensional do turista em função da memória normalizada após $N_p = N$ passos. As distribuições estão normalizadas para cada valor de $\tilde{\mu}$. Os gráficos foram obtidos para $M = 100000$ mapas com $N = 10000$ pontos e $1 \leq \mu \leq 50$ p. 77

- 21 Visão superior da Fig. 20 mostrando as curvas de nível na região central. Pode-se notar nitidamente a atenuação e o espalhamento das distribuições na região de transição. Os gráficos foram obtidos para $M = 100000$ mapas com $N = 10000$ pontos e $1 \leq \mu \leq 50$. . . p. 77
- 22 Distribuição da posição final do turista após N passos para $\mu = 5, 6, 7$ e 8 . As linhas contínuas indicam o ajuste efetuado por curvas q -gaussianas. As distribuições para $\mu \leq 4$ são gaussianas. p. 77
- 23 Distribuição da posição final do turista após N passos para $\mu = 9, 10, 11, 12$ e 13 . As linhas contínuas indicam o ajuste efetuado por curvas q -gaussianas. p. 78
- 24 Distribuição da posição final do turista após N passos para $\mu = 14, 16, 18, 20$ e 22 . As linhas contínuas indicam o ajuste efetuado por curvas q -gaussianas. p. 78
- 25 Distribuição da posição final do turista após N passos para $\mu = 23, 25, 27$ e 29 . As linhas contínuas indicam o ajuste efetuado por curvas q -gaussianas. As distribuições para $\mu \geq 30$ são gaussianas. p. 78
- 26 Valores do parâmetro de ajuste q em função da memória μ para as curvas de $P_{\mu}(x)$ p. 79
- 27 Variância σ^2 das curvas de $P_{\mu}(x)$ em função da memória μ . É interessante notar a divergência na variância em torno da memória crítica. Esta região coincide com o valor máximo de q no gráfico da Fig. 26. Nas Figs. 20 e 21, esta região equivale à menor amplitude e máximo espalhamento da função $P_{\mu}(x)$ p. 80

1 *Introdução*

As caminhadas aleatórias têm sido objeto de estudo bastante aprofundado em ciências, desde o final do século XIX. Esse tipo de caminhada, seja sobre uma rede regular ou em um meio desordenado, tem sido utilizado para modelar desde fenômenos de transporte [1, 2] até variações do mercado financeiro [3].

As caminhadas deterministas, por outro lado, têm sido bem menos estudadas, sendo que só recentemente passaram a ser utilizadas para modelar sistemas como a busca de alimento por animais [4, 5], a busca de um bom negócio por um agente financeiro [6], a propagação direta em redes regulares [7], as redes lingüísticas [8, 9], entre outros.

Nesta Dissertação, tratamos de uma dinâmica de caminhada determinista em um meio desordenado. Este meio é caracterizado por N pontos aleatoriamente distribuídos em um hipercubo de d dimensões. As coordenadas dos pontos seguem uma distribuição uniforme ao longo dos eixos do hipercubo. Cada ponto pode ser entendido como cidades em um mapa. De cada cidade um viajante pode partir para explorar o meio utilizando a regra determinista de visitar sempre a cidade mais próxima daquela em que se encontra e que não tenha sido visitada nos últimos μ passos. Esta dinâmica de movimentação leva a trajetórias diferentes para cada cidade de origem. Todas as trajetórias são formadas por uma parte transiente de comprimento t e um ciclo de período p , denominado atrator. Esta caminhada é denominada *caminhada determinista do turista* [9, 10, 11]. Note que esta regra pode ser modificada de modo a permitir que o viajante se desloque para qualquer cidade com probabilidade dependente da distância que o separa dela. Esta variante é chamada de *caminhada estocástica do turista*.

Esta dissertação trata exclusivamente da caminhada determinista do turista em meios unidimensionais e apresenta dois objetivos principais:

- demonstrar a existência de uma memória crítica que provoca uma transição entre um regime de exploração localizado (em que a exploração é apenas local) e um estendido (em que o viajante explora todo o sistema) e determinar o seu valor, e

- entender como se dá a evolução da exploração no estado estacionário ao redor desta memória. O estado estacionário é caracterizado pelo aprisionamento do viajante nos ciclos.

No Capítulo 2, apresentamos o formalismo matemático dos fenômenos de transporte, através da equação de difusão e sua solução. Mostramos também como as caminhadas aleatórias podem ser utilizadas, através do Teorema do Limite Central, como modelo para os processos difusivos. Finalmente apresentamos a difusão anômala, cujo comportamento difere da difusão tradicional por apresentar uma dependência não linear do desvio quadrático médio com o tempo.

No Capítulo 3, apresentamos o modelo da caminhada determinista do turista. O meio onde a caminhada ocorre é caracterizado por seus aspectos inerentes, como, por exemplo, a probabilidade de vizinhanças e os efeitos de borda. Os efeitos de borda são estimados quantitativamente de modo original, considerando a borda do sistema como a região de um hipercubo que não está contida na hiperesfera inscrita. Apresentamos também um programa computacional desenvolvido para visualizar as caminhadas em ambientes de uma, duas e três dimensões. Em seguida, são apresentados os aspectos dinâmicos da caminhada: a tabela de vizinhança e o grafo do turista, bem como algumas situações interessantes que ocorrem quando alteramos os parâmetros da caminhada, apresentando as estatísticas associadas a cada caso. No final do Capítulo apresentaremos os modelos de campo médio, que representam o limite do modelo para altas dimensões.

No Capítulo 4, apresentamos uma breve descrição do processo de percolação. Em seguida determinamos numérica e analiticamente a probabilidade do viajante conseguir atravessar o sistema para uma dada memória μ . A partir dessa probabilidade, determinamos o valor de memória μ_1 na qual ocorre a transição entre os regimes localizado e estendido de exploração da caminhada do turista unidimensional. Finalmente determinamos a largura da região de transição e mostramos que ela não depende do tamanho do sistema considerado, caracterizando uma transição de fase.

No Capítulo 5, apresentamos a caracterização da dinâmica de exploração no estado estacionário da caminhada unidimensional do turista e mostramos que segue um modelo de difusão anômala. Mostramos ainda que na região em que μ está distante de μ_1 , a movimentação do turista segue uma difusão do tipo gaussiana, mas região próxima a μ_1 esta movimentação segue um modelo de superdifusão não-linear (q -gaussiana), que se transforma em distribuições α -estáveis de Lévy.

No Capítulo 6, são apresentadas algumas considerações com relação às dificuldades encontradas deste trabalho, no que se refere exclusivamente aos processos de simulação numérica. Mostramos também como essas dificuldades foram superadas.

As conclusões finais desta dissertação e as perspectivas de trabalhos futuros são apresentadas no Capítulo 7.

No Apêndice A são definidas algumas funções especiais usadas ao longo do texto desta dissertação. No Apêndice B são revistos resumidamente alguns conceitos básicos da teoria de distribuições de probabilidades. Finalmente, no Apêndice C são apresentados os métodos de estimação de parâmetros por máxima verossimilhança e por mínimos quadrados.

2 *Fenômenos de Transporte Normais e Anômalos*

A difusão é um processo natural através do qual um dado sistema, com determinadas condições iniciais, se encaminha para o equilíbrio. Os fenômenos de difusão, também chamados de fenômenos de transporte, têm sido amplamente estudados, desde que Adolf Fick descreveu tais transientes de forma puramente fenomenológica [12]. Neste capítulo apresentamos o formalismo matemático dos processos difusivos, através da equação de difusão e sua solução. Mostramos também como as caminhadas aleatórias podem ser utilizadas, através do Teorema do Limite Central, como modelo para os processos difusivos. Finalmente apresentamos a difusão anômala, cujo comportamento difere da difusão tradicional por apresentar uma dependência não linear do desvio quadrático médio com o tempo. Curiosidades históricas são brevemente mencionadas.

2.1 Difusão Tradicional

A difusão é um fenômeno de transporte que pode ser ilustrado por moléculas de um soluto que se espalham em um meio fluido. Ela é consequência da segunda lei da Termodinâmica, produzindo um sentido para o fluir do tempo, quebrando, assim, a simetria de inversão temporal da Mecânica Newtoniana. No exemplo considerado de difusão, se dá no sentido da região de mais alta concentração de soluto (onde há uma grande quantidade de partículas) para a de mais baixa concentração (onde há menor quantidade), aumentando assim a entropia do sistema. Dessa forma, a difusão é um processo natural e espontâneo.

A difusão está baseada em dois princípios:

- o transporte total de matéria através de uma superfície unitária é proporcional ao gradiente da concentração do material na direção perpendicular a essa área (lei de Fick [12]), e

- a matéria é conservada no espaço livre de modo que unidades difusivas não são nem criadas nem destruídas durante o movimento.

Assim:

1. Lei de Fick:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = -D\vec{\nabla}\rho(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

2. Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial\rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.2)$$

onde $\rho(\vec{r}, t)$ é a densidade de soluto (quantidade de partículas de soluto por unidade de volume) na posição $\vec{r}$ e no instante t , D é o coeficiente de difusão, que pode variar em função de $\vec{r}$ e de $\rho(\vec{r}, t)$, e $\vec{J}(\vec{r}, t)$ é a densidade de corrente de partículas, definida em termos da velocidade local $\vec{v}(\vec{r}, t)$ por:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \vec{v}(\vec{r}, t). \quad (2.3)$$

Substituindo a Eq. 2.1 na Eq. 2.2:

$$\frac{\partial\rho(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot [D\vec{\nabla}\rho(\vec{r}, t)]. \quad (2.4)$$

Neste trabalho consideraremos D como sendo independente da posição $\vec{r}$ e da concentração de partículas $\rho(\vec{r}, t)$. Dessa forma a Eq. 2.4 se torna:

$$\frac{\partial\rho(\vec{r}, t)}{\partial t} = D\vec{\nabla}^2\rho(\vec{r}, t), \quad (2.5)$$

que é conhecida como “equação da difusão”.

Em uma dimensão, ela é escrita como:

$$\frac{\partial\rho(x, t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2\rho(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.6)$$

Multiplicando a Eq. 2.6 por e^{ikx} e integrando para todos os valores de x , resulta:¹

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}(k, t) = -Dk^2 \tilde{\rho}(k, t), \quad (2.7)$$

onde $\tilde{\rho}(k, t)$ é a função característica da densidade de partículas $\rho(x, t)$, definida pela

¹Considera-se $\rho(\pm\infty, t) = \frac{d\rho(x, t)}{dx}|_{x=\pm\infty} = 0$.

Eq. B.10 no Apêndice B. Sendo $\tilde{\rho}(k, 0)$ a transformada de Fourier² da concentração inicial:

$$\tilde{\rho}(k, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} \rho(x, 0), \quad (2.8)$$

a solução da Eq. 2.7 é:

$$\tilde{\rho}(k, t) = \tilde{\rho}(k, 0) e^{-Dk^2 t}. \quad (2.9)$$

Uma distribuição inicial particularmente importante é dada por $\rho(x, 0) = \delta(x - x_0)$, indicando que todas as partículas estão na posição x_0 no instante $t = 0$, e a Eq. 2.8 se torna:³

$$\tilde{\rho}(k, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} \delta(x - x_0) = e^{ikx_0}. \quad (2.10)$$

Substituindo a Eq. 2.10 na Eq. 2.8 e realizando a transformação de Fourier inversa, temos:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} e^{ikx_0} e^{-Dk^2 t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{2Dt}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sqrt{2Dt}}\right)^2}. \quad (2.11)$$

A Eq. 2.11 é uma função densidade de probabilidade (pdf) gaussiana⁴, com média $\mu = x_0$ e variância $\sigma^2 = 2Dt$. Considerando o deslocamento $R = x - x_0$ em vez da posição x , a Eq. 2.11 pode ser escrita como:

$$P(R, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{2Dt}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{R}{\sqrt{2Dt}}\right)^2}, \quad (2.12)$$

onde $P(R, t)$ é a probabilidade que uma partícula difunda por uma distância entre R e $R + dR$ no intervalo de tempo entre t e $t + dt$.

A Eq. 2.12 mostra que, durante o processo de difusão em um meio isotrópico, o soluto se espalha radialmente, com a concentração no centro diminuindo proporcionalmente a $t^{-1/2}$, a medida que o raio de espalhamento aumenta proporcionalmente a $t^{1/2}$.

Em um tempo suficientemente longo, pode-se esperar que a distribuição de soluto no meio seja praticamente uniforme.

²A transformada de Fourier é definida no Apêndice A.

³A função delta de Dirac $\delta(x)$ é definida no Apêndice A.

⁴A gaussiana (também conhecida como função densidade de probabilidade normal) é caracterizada pelos parâmetros média(μ) e variância (σ^2) e definida por:

$$N_x(\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(x-\mu)^2/(2\sigma^2)}.$$

É interessante observar que a representação usual da gaussiana é contrária à representação tradicional, uma vez que a variável é colocada como índice, enquanto que os parâmetros são colocados como argumentos.

2.2 Caminhada Aleatória

Processos difusivos podem ser modelados por modelos discretos, como a caminhada aleatória.

2.2.1 A caminhada aleatória de Pearson

O termo “caminhada aleatória” foi proposto originalmente por Karl Pearson em uma carta publicada pela revista *Nature*, em 27 de julho de 1905 [13, 14]. Nesta carta, cujo interesse era determinar a forma como os mosquitos disseminam a malária, Pearson propunha um problema intitulado “The problem of random walk”:

A man starts from the point O and walks ℓ yards in a straight line; he then turns through any angle whatever and walks another ℓ yards in a second straight line. He repeats this process n times. I require the probability that after n stretches he is at a distance between R and $R + \delta R$ from his starting point O .⁵

Sua carta foi respondida na semana seguinte por Lord Rayleigh, que havia resolvido uma forma mais generalizada do problema em 1880, ao estudar ondas sonoras em materiais heterogêneos [1]. Segundo Rayleigh, a probabilidade procurada por Pearson, em meios bidimensionais, é dada por:

$$P_n(R) dR \approx \frac{2R}{n} e^{-R^2/n} dR. \quad (2.13)$$

Rayleigh também mostrou que, para caminhadas em uma dimensão, com passos de comprimento unitário, a solução é:

$$P_n(R) dR = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^{-R^2/2n} dR, \quad (2.14)$$

o que demonstra um comportamento gaussiano no afastamento do caminhante em relação ao ponto de partida O .

2.2.2 Caminhada aleatória como modelo de difusão

Por volta dessa mesma época, em 1900, Louis Bachelier aplicou a teoria da caminhada aleatória ao mercado financeiro, em sua tese de doutorado, *La Théorie de la*

⁵Embora ℓ seja finito e n discreto, a posição final da caminhada pode ser qualquer ponto do círculo centrado em O e raio $n\ell$, uma vez que o caminhante pode mudar a direção para qualquer ângulo no intervalo $[0, 2\pi]$. Dessa forma, a distância R entre a posição final e o ponto de origem será uma variável aleatória contínua.

Spéculation [3]. Ele considerou que as flutuações de valores eram aleatórias e independentes. Dessa forma, ele pôde modelá-las como caminhadas aleatórias independentes, nas quais o comprimento dos passos não é fixo, mas variável. A cada passo, o caminhante se move de uma quantidade ΔX_N , escolhida com probabilidade $p_N(\vec{r})$. Considerando que os passos sejam independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.), então $p_N(\vec{r}) = p(\vec{r})$. Seja $P_n(\vec{R})$ a probabilidade de encontrar-se na posição $\vec{R}$ após n passos. Assim, a distribuição dos caminhantes após n passos, conhecida como equação de Bachelier, é:

$$P_{n+1}(\vec{R}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} p(\vec{r}) P_n(\vec{R} - \vec{r}). \quad (2.15)$$

Aparentemente, Bachelier foi o primeiro a perceber que a solução da Eq. 2.15, em uma dimensão, também satisfazia equação de condução de calor de Fourier [1, 3] e a equação de difusão (Eq. 2.5).

De fato, expandindo $P_n(\vec{R} - \vec{r})$ em série de Taylor na Eq. 2.15, obtém-se:⁶

$$\begin{aligned} P_{n+1}(\vec{R}) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} p(\vec{r}) \left[P_n(\vec{R}) - \vec{r} \frac{dP_n(\vec{R})}{d\vec{r}} + \frac{1}{2} \vec{r} \frac{d^2 P_n}{d\vec{r}^2} \vec{r} + \dots \right] \\ &= P_n(\vec{R}) - \langle \vec{r} \rangle \frac{dP_n(\vec{R})}{d\vec{r}} + \frac{\langle r^2 \rangle}{2} \frac{d^2 P_n}{d\vec{r}^2} + \dots \end{aligned}$$

Considerando que os deslocamentos são isotrópicos⁷, $\langle \vec{r} \rangle = 0$. Como as parcelas em r decaem rapidamente, podem ser desprezadas as de ordem maior do que 2. A Eq. 2.15 passa a ser escrita como:

$$P_{n+1}(\vec{R}) - P_n(\vec{R}) = \frac{\langle r^2 \rangle}{2} \frac{d^2 P_n}{d\vec{r}^2}. \quad (2.16)$$

Como cada passo é dado em intervalos regulares de tempo (Δt), definindo $t = n\Delta t$ obtemos:

$$\frac{P_{n+1}(\vec{R}) - P_n(\vec{R})}{\Delta t} = \frac{\langle r^2 \rangle}{2\Delta t} \frac{d^2 P_n}{d\vec{r}^2}, \quad (2.17)$$

para $\Delta t \rightarrow 0$, podemos escrever, finalmente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \vec{\nabla}^2 \rho, \quad (2.18)$$

que é a equação da difusão, onde $\rho(\vec{R}, t) = P_t(\vec{R})$ e $D = \langle r^2 \rangle / 2\Delta t$.

⁶Ver a definição de valor esperado para uma função de uma variável aleatória contínua associada a uma pdf no Apêndice B.

⁷Neste caso, os deslocamentos de qualquer distância e em quaisquer direções são equiprováveis, de forma que o valor médio é nulo.

A solução desta equação em uma dimensão (conforme visto na seção 2.1) é dada pela Eq. 2.12. Mas $D = \langle r^2 \rangle / 2\Delta t$ e $t = n\Delta t$, então, $D = n\langle r^2 \rangle / 2t$. Fazendo estas substituições, a Eq. 2.12 se torna, então:

$$P_n(R) = \frac{e^{-R^2/2\langle r^2 \rangle n}}{\sqrt{2\pi\langle r^2 \rangle n}}, \quad (2.19)$$

que é a mesma solução encontrada por Rayleigh, no caso de passos de comprimento unitário, ou seja, $\langle r^2 \rangle = 1$.

No mesmo ano em que Pearson escreveu sua carta para a Nature, Albert Einstein publicou seu trabalho a respeito do movimento Browniano [2].⁸ Nele, Einstein modelou o movimento browniano observado em partículas em suspensão em um fluido como uma caminhada aleatória resultante das colisões dessas partículas com as moléculas do fluido. O método que ele utilizou foi semelhante ao utilizado por Bachelier, embora aparentemente ele desconhecesse os trabalhos anteriores de Rayleigh e Bachelier [1].

2.2.3 Limite gaussiano da caminhada aleatória

Vejamos um outro modelo de caminhada aleatória: um indivíduo se desloca sobre uma trajetória retilínea ($d = 1$), a partir da origem, dando passos de comprimento unitário no sentido positivo da trajetória com probabilidade p ou no sentido contrário com probabilidade $q = 1 - p$. O problema consiste em encontrar a probabilidade $P_n(R)$ de encontrar o indivíduo na posição R depois de ter dado n passos (com R inteiro)⁹.

A probabilidade de que, em um total de n passos, sejam dados k passos no sentido positivo da trajetória (e conseqüentemente $n - k$ passos no sentido contrário) segue uma distribuição binomial, ou seja,

$$P_n(k) = \binom{n}{k} p^k q^{n-k}. \quad (2.20)$$

O valor médio de k é $\langle k \rangle = np$ e o valor médio de $n - k$ é $\langle n - k \rangle = nq$. Considerando que $R = k - (n - k) = 2k - n$, temos que o valor médio de R é $\langle R \rangle = \langle 2k - n \rangle = 2\langle k \rangle - n = 2np - n = n(2p - 1) = n(p - q)$.¹⁰

⁸Este trabalho de Einstein teve um grande impacto ao fornecer uma forte evidência da existência da molécula.

⁹Este novo modelo é chamado de *caminhada com tendência* (biased) ou *de arrasto*, enquanto que a caminhada tratada por Pearson e Rayleigh é chamada de *caminhada persistente*.

¹⁰Ver a definição de valor médio de uma variável aleatória discreta no Apêndice B.

A distribuição binomial da Eq. 2.20 pode ser aproximada, para $n \gg 1$, por [15]:

$$P_n(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi npq}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(k - np)^2}{npq} \right]. \quad (2.21)$$

Expandindo o numerador do argumento da função exponencial na Eq. 2.21, temos:

$$\begin{aligned} k - np &= 2k - k - np + n - n + nq - nq \\ &= (2k - n) - n(p - q) + (n - k) - nq \\ &= R - \langle R \rangle + (n - k) - \langle n - k \rangle, \end{aligned}$$

como $n \gg k$, podemos assumir que $\langle n - k \rangle = n - k$, dessa forma,

$$k - np = R - \langle R \rangle. \quad (2.22)$$

Se considerarmos que os passos são isotrópicos, temos $p = q = 1/2$ e, portanto, $\langle R \rangle = 0$ e, como $n \rightarrow \infty$, $npq \approx n$. Assim, podemos escrever a Eq. 2.21 como:

$$P_n(R) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^{-R^2/2n}. \quad (2.23)$$

É interessante notar que, apesar de concordarem perfeitamente, este resultado e os encontrados por Rayleigh, para a caminhada persistente de Pearson (Eq. 2.14), e por Bachelier (Eq. 2.19) foram obtidos a partir de problemas diferentes. No problema de Pearson, a direção da caminhada é aleatória, mas o comprimento do passo é constante, no caso unidimensional corresponde a uma caminhada em que o caminhante pode continuar no mesmo sentido do passo anterior com probabilidade p ou mudar de sentido com probabilidade $q = 1 - p$ (caminhada persistente). No problema de Bachelier, tanto a direção quanto o comprimento do passo são obtidos aleatoriamente, sendo um caso mais genérico do problema de Pearson. Já nesta última abordagem (caminhada com tendência), os passos têm comprimento constante e p representa a probabilidade de dar um passo num determinado sentido (por exemplo à direita) e $q = 1 - p$ a de dar o passo no sentido contrário. Independentemente dessas diferenças, porém, a pdf da posição final dos caminhantes após um grande número de passos é dada por uma distribuição normal (gaussiana)¹¹.

Uma outra forma de obter a pdf do deslocamento em uma caminhada aleatória consiste em considerar um processo aditivo. Consideremos um caminhante na posição x_0 . Em cada

¹¹Note-se que, apesar de todos os casos apresentarem uma pdf gaussiana, as médias e as variâncias são diferentes, exceto no caso isotrópico.

intervalo de tempo ele se move de uma distância Δx , que segue uma distribuição $\rho(\Delta x)$. Assim:

$$x_i = x_{i-1} + \Delta x_i \Rightarrow R_i = x_i - x_0 = \sum_{i=1}^n \Delta x_i. \quad (2.24)$$

Pelo teorema do limite central¹², R_i segue uma distribuição normal dada por:

$$\rho(R_i) = N \left[n \langle \Delta x \rangle, n \left(\langle \Delta x^2 \rangle - \langle \Delta x \rangle^2 \right) \right],$$

onde $\langle \Delta x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) \Delta x$ e $\langle \Delta x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) (\Delta x)^2$.

Uma vez que a função de distribuição normal é solução tanto para a equação de difusão como para os vários tipos de caminhada aleatória, pelo teorema do limite central, conclui-se que estas últimas são uma forma simples e bastante adequada de modelar processos difusivos.

2.3 Difusão Anômala

Apesar da descrição de Fick da difusão ser puramente fenomenológica, Einstein mostrou que sua dinâmica estava relacionada com a aleatoriedade do movimento browniano. A explicação de Einstein para a difusão e a caminhada aleatória de Pearson se baseiam nos mesmos princípios:

- a existência de um caminho livre médio (o comprimento dos passos, no problema de Pearson, e a distância média entre as colisões, no caso de Einstein), e
- a existência de um tempo médio de vôo para efetuar cada passo ou entre as colisões.

Por esse motivo, nota-se, em ambos os casos, a dependência linear do desvio quadrático médio em relação ao tempo, isto é, $\langle x^2 \rangle \propto t$. De fato, esta é uma consequência direta do teorema do limite central e da natureza markoviana do processo estocástico¹³ [17].

Entretanto, a partir de meados da década de 1970, processos de difusão que não se adaptam ao modelo descrito por Einstein têm sido cada vez mais estudados. Um exemplo é o princípio de funcionamento das impressoras a laser e das fotocopiadoras. Ele se baseia

¹²Ver a seção B.7 do Apêndice B.

¹³Um processo estocástico é um conjunto ordenado de variáveis aleatórias $\{X_t\}$, associado com sua distribuição de probabilidades. A noção de processo estocástico é útil para descrever, por exemplo, o comportamento de um sistema que evolui com o tempo. Um processo markoviano é um processo estocástico em que o estado futuro de uma variável aleatória é completamente determinado pelo seu estado atual, isto é: $X_{t+1} = f(X_t)$ [16].

no transporte de portadores cargas em semicondutores amorfos no interior de um campo elétrico. No início da década de 1970, ficou claro que o movimento desses portadores de carga não podia ser descrito pela equação da difusão tradicional. O problema foi resolvido em 1975, quando Harvey Scher, da Xerox, e Eliot Montroll, da Universidade de Rochester, mostraram que cargas em movimento em meios amorfos tendem a ficar aprisionadas em imperfeições locais, sendo liberadas por flutuações térmicas [14, 18]. Isto significa que o tempo de aprisionamento é melhor descrito por uma distribuição de Lévy¹⁴ do que por uma gaussiana.

Outros processos difusivos que não seguem a difusão tradicional têm sido estudados em sistemas como difusão em plasmas [19], difusão em fluidos turbulentos [20, 21], transporte de fluidos em meios porosos [22], difusão em fractais [23], análise de histogramas de batidas do coração em indivíduos saudáveis [24], entre outros sistemas físicos. Processos deste tipo são chamados de *difusão anômala*.

O comportamento anômalo pode ser verificado no crescimento da variância como uma lei de potência:

$$\sigma^2 \propto t^\beta. \quad (2.25)$$

Neste caso, em relação ao expoente β , o processo pode ser:

- subdifusivo, se $\beta < 1$, neste caso a mobilidade é menor do que numa difusão normal,
- normal, se $\beta = 1$, ou
- superdifusivo, se $\beta > 1$, neste caso a mobilidade é maior do que numa difusão normal.

A equação geral da difusão é:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^\xi \rho^{2-q}(x, t)}{\partial x^\xi}, \quad (2.26)$$

onde $\xi \in \mathbb{R}$ é a ordem da derivada e $q, D \in \mathbb{R}$.

¹⁴A distribuição de Lévy é definida por:

$$L_c(x) = \sqrt{\frac{c}{2\pi}} \frac{e^{-c/2x}}{x^{3/2}},$$

com parâmetro de escala $c > 0$ e com $x \geq 0$. Note-se que esta distribuição não admite nem primeiro nem segundo momentos.

2.3.1 Equação de Difusão Não-Linear

Uma outra forma de modelar a difusão anômala é relaxar a condição de independência das variáveis no teorema do limite central de Gauss, obtendo a equação de difusão correlacionada, ou equação de difusão para meios porosos [17, 25]. A forma unidimensional desta equação é obtida fazendo $\xi = 2$ na Eq. 2.26:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho^{2-q}(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.27)$$

Para uma concentração inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$ e sem limites, esta equação tem solução dependente do tempo do tipo Barenblatt-Pattle [25]:

$$\rho(x, t) = G_{q,a^2}(x) = \frac{\gamma}{\sqrt{a^2\pi}} \left[1 - (1-q) \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right]^{1/(1-q)}, \quad (2.28)$$

onde G_{q,a^2} é a função q -gaussiana, definida por¹⁵:

$$G_{q,a^2}(x) = \frac{\gamma}{\sqrt{a^2\pi}} e_q \left(-\frac{x^2}{a^2} \right), \quad (2.29)$$

com a^2 dependente do tempo dado por:

$$a^2(t) = [2Dt(2-q)(3-q)\gamma^{q-1}]^{2/(3-q)}, \quad (2.30)$$

e γ responsável pela normalização¹⁶:

$$\gamma = \begin{cases} \frac{\Gamma(\frac{5-3q}{2(q-1)})}{\Gamma(\frac{2-q}{1-q})} \sqrt{1-q} & \text{se } q < 1, \\ 1 & \text{se } q = 1, \\ \frac{\Gamma(\frac{1}{q-1})}{\Gamma(\frac{3-q}{2(q-1)})} \sqrt{q-1} & \text{se } 1 < q < 3. \end{cases} \quad (2.31)$$

Uma característica da q -gaussiana é que, ajustando o valor do parâmetro q , várias outras podem ser obtidas [25]:

- $q = 1$ resulta na distribuição gaussiana,
- $q = 2$ resulta na distribuição de Cauchy,
- $q = (n+3)/(n+1)$ resulta na distribuição t de Student com n graus de liberdade.

¹⁵A função $e_q(x)$ é a função exponencial generalizada, definida no Apêndice A.

¹⁶A Eq. 2.29 é normalizável para $q < 3$.

A partir do segundo momento¹⁷, podemos determinar a variância da função $G_{q,a^2}(x)$:

$$\sigma_q^2 = \frac{a^2}{5-3q} = \frac{[2Dt(2-q)(3-q)\gamma^{q-1}]^{2/(3-q)}}{5-3q}, \quad (2.32)$$

que mostra a relação do parâmetro a^2 com o espalhamento da função.

Neste caso, a dependência entre a variância e o tempo é dada por:

$$\sigma_q^2 \propto t^{2/(3-q)}. \quad (2.33)$$

Dessa forma, o processo de difusão descrito pela Eq. 2.27 pode ser:

- subdifusivo, se $q < 1$,
- normal, se $q = 1$,¹⁸ ou
- superdifusivo, se $1 < q < 3$,

porém a variância só será finita para $q < 5/3$.

O tipo de distribuição resultante depende do valor do expoente q . Para $q < 1$, $\rho(x, t) = 0$ quando $1 - (1 - q)x^2/a^2(t) < 0$, implicando em um comportamento de cauda curta, comparado com a gaussiana, com um corte em $x_0(t) = [(1 - q)/a^2(t)]^{-1/2}$.¹⁹ Para $1 < q < 3$, a distribuição tem cauda longa, com comportamento assintótico do tipo lei de potência, com $\rho(x, t) \propto x^{-2/(q-1)}$ [17]. Um caso particular ocorre quando $q = 2$. Neste caso, não há difusão, visto que $\rho(x, t)$ se torna independente do tempo [$\partial\rho(x, t)/\partial t = 0$] e a variância tende ao infinito, transformando-se em uma distribuição de Cauchy [25]:

$$C_a(x) = \frac{a}{\pi(x^2 + a^2)}. \quad (2.34)$$

2.3.2 Equação de Difusão de Lévy-Gnedenko

Em alguns processos difusivos, a variância pode não ser finita, de modo que o teorema do limite central de Gauss não se aplica. A análise destes processos depende da genera-

¹⁷Ver no Apêndice B a definição de momento de uma distribuição de probabilidades.

¹⁸De fato, com $q = 1$, a Eq. 2.27 se torna a equação de difusão em uma dimensão (Eq. 2.6), cuja solução é dada pela Eq. 2.11. O limite da Eq. 2.28 para $q \rightarrow 1$ é (de acordo com a propriedade dada pela Eq. A.19 no Apêndice A):

$$\lim_{q \rightarrow 1} G_{q,a^2} \left[-\frac{x^2}{a^2(t)} \right] = \frac{1}{\sqrt{4Dt\pi}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}},$$

que é a Eq. 2.11.

¹⁹ $\rho(x, t)$ é uma pdf e, como tal deve ser nula ou positiva.

lização do teorema do limite central, feita por Paul Lévy e Boris V. Gnedenko²⁰. Neste caso, visa-se relaxar a condição de segundo momento finito no teorema do limite central de Gauss. O estudo deste tipo de difusão anômala pode levar a equações diferenciais parciais de ordem fracionária, obtidas fazendo $q = 1$ na Eq. 2.26:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^\xi \rho(x, t)}{\partial x^\xi}. \quad (2.35)$$

Esta equação tem solução do tipo α -estável de Lévy, definida por:

$$f(x : \alpha, \beta, c, \mu) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{f}(k : \alpha, \beta, c, \mu) e^{-ikx}, \quad (2.36)$$

com:

$$\tilde{f}(k : \alpha, \beta, c, \mu) = \exp [\imath k \mu - |ck|^\alpha (1 - \imath \beta \operatorname{sgn}(k) \Phi(k, \alpha))], \quad (2.37)$$

onde $\operatorname{sgn}(k)$ é o sinal de k e

$$\Phi(k, \alpha) = \begin{cases} \tan(\pi\alpha/2) & \text{se } \alpha \neq 1, \\ -(2/\pi) \log |k| & \text{se } \alpha = 1. \end{cases} \quad (2.38)$$

Os parâmetros da distribuição são:

- μ é o parâmetro de deslocamento e indica a média quando $\alpha \leq 1$;
- c é o fator de escala e mede o espalhamento da distribuição;
- $\alpha \in]0, 2]$ é o expoente ou índice da distribuição e indica o comportamento assintótico da distribuição para $\alpha < 2$; e
- $\beta \in [-1, 1]$ indica a simetria da distribuição em torno de μ , se $\beta = 0$, a distribuição é simétrica.

A distribuição α -estável de Lévy não pode ser expressa analiticamente, exceto para alguns casos particulares [26]:

- para $\alpha = 2$, a distribuição é gaussiana, com média μ e variância $\sigma^2 = 2c^2$, neste caso o parâmetro β não tem significado;
- para $\alpha = 1$ e $\beta = 0$, temos a distribuição de Cauchy, com parâmetros de escala c e de deslocamento μ ;

²⁰Ver a seção B.8 do Apêndice B.

- para $\alpha = 1/2$ e $\beta = 1$, temos a distribuição de Lévy, com parâmetros de escala c e de deslocamento μ ;
- no limite de $c \rightarrow 0$ ou $\alpha \rightarrow 0$, a distribuição se torna a função delta de Dirac: $\delta(x - \mu)$.

2.4 Conclusão

A difusão consiste em um processo natural e espontâneo que ocorre quando os sistemas se encaminham para o equilíbrio, como consequência da Segunda Lei da Termodinâmica. Ela se baseia no princípio da conservação da matéria e na proporcionalidade entre fluxo de matéria e o gradiente de sua concentração na direção do fluxo. Como consequência, a distribuição de matéria no espaço em função do tempo, em um meio isotrópico, tem um comportamento gaussiano, com a concentração no centro diminuindo proporcionalmente a $t^{-1/2}$, enquanto que o raio de espalhamento aumenta proporcionalmente a $t^{1/2}$.

Considerando que, pelo teorema do limite central de Gauss, a distribuição limite para processos estocásticos de natureza markoviana é a distribuição gaussiana, as caminhadas aleatórias, como as propostas por Bachelier em 1900 ou por Pearson em 1905, são uma forma simples e bastante adequadas de modelar processos difusivos. De fato, Einstein mostrou, também em 1905, que o movimento browniano de partículas em meios fluidos pode ser entendida como uma caminhada aleatória devido ao choque das partículas difusivas com as moléculas do fluido. Nestes processos, o desvio quadrático médio é linearmente dependente do tempo, caracterizando um comportamento gaussiano.

Entretanto, a partir de meados da década de 1970, começaram a ser estudados processos difusivos que não se adaptam ao modelo descrito por Einstein. Este tipo de processo passou a ser conhecido como *difusão anômala*. Nele, o crescimento da variância da distribuição da concentração se dá por uma lei de potência: $\sigma^2 \propto t^\beta$. O expoente β determina se o processo é subdifusivo ($\beta < 1$), normal ($\beta = 1$) ou superdifusivo ($\beta > 1$).

O comportamento deste tipo de difusão, para o caso não-linear, é dado pela distribuição gaussiana generalizada, ou q -gaussiana. Para processos subdifusivos, a distribuição q -gaussiana apresenta uma cauda curta com um corte em $x_0(t) = [(1-q)/a^2(t)]^{-1/2}$. Para processos superdifusivos, a distribuição q -gaussiana apresenta uma cauda longa, do tipo lei de potência, com a concentração proporcional a $x^{-2/(q-1)}$.

Outra forma de modelar a difusão anômala consiste em relaxar a condição de segundo

momento finito no teorema do limite central de Gauss. Esta condição leva às distribuições α -estáveis de Lévy e ao teorema do limite central generalizado de Lévy-Gnedenko. Da mesma forma que as q -gaussianas, as α -estáveis podem assumir uma grande variedade de formas, dependendo dos valores dos parâmetros.

3 *Aspectos Gerais da Caminhada Determinista do Turista*

No Capítulo 2, introduzimos as caminhadas aleatórias e mostramos como elas têm sido amplamente estudadas. Elas são utilizadas para modelar os mais diversos sistemas dinâmicos, desde a difusão de partículas até as variações do mercado financeiro.

As caminhadas deterministas, por outro lado, têm sido bem menos estudadas, sendo que só recentemente passaram a ser utilizadas para modelar sistemas como a busca de alimento por animais [4, 5], a busca de um bom negócio por um agente financeiro [6], a propagação direta em redes regulares [7], as redes lingüísticas [8, 9], entre outros.

Diferentemente da caminhada aleatória, a caminhada determinista segue uma regra pré-definida de movimentação. Dessa forma, a caminhada se repete sempre da mesma maneira, se preservadas as condições iniciais e se o meio subjacente não se alterar.

Neste capítulo apresentamos uma dinâmica de caminhada determinista em um meio desordenado, denominada *caminhada determinista do turista*. Inicialmente, caracterizaremos o meio onde a caminhada ocorrerá, apresentando alguns de seus aspectos inerentes, como:

- a probabilidade de vizinhanças,
- os efeitos de borda, que serão estimados quantitativamente de modo original, considerando a borda do sistema como a região de um hipercubo que não está contida na hiperesfera inscrita, e
- as condições de contorno.

Em seguida, apresentaremos os aspectos dinâmicos da caminhada:

- a tabela de vizinhança e
- o grafo do turista,

bem como algumas situações interessantes que ocorrem quando alteramos os parâmetros da caminhada, apresentando as estatísticas associadas a cada caso. Finalmente apresentaremos os modelos de campo médio, que representam o limite do modelo para altas dimensionalidades.

3.1 Meio Desordenado

Pode-se entender um meio desordenado (mapa) como um espaço d -dimensional no qual são distribuídos aleatoriamente N pontos (sítios), seguindo uma pdf uniforme em cada coordenada. Uma vez que não existe memória na distribuição de pontos, este é um processo poissônico.

Por uma questão de simplicidade, limitaremos o espaço a um hipercubo de d dimensões e aresta unitária no espaço euclidiano. Assim, nosso meio desordenado será formado por N pontos cujas coordenadas serão distribuídas aleatoriamente, com função densidade de probabilidade uniforme, no intervalo $[0, 1[$, ao longo de cada eixo do espaço.

Este meio pode ser representado por uma *matriz de distâncias* $\hat{\mathbf{D}}_{N \times N}$, em que cada elemento $\hat{D}_{ij}$ representa a distância entre dois sítios i e j quaisquer através da métrica euclidiana:

$$\hat{D}_{ij} = \left[\sum_{k=1}^d \left(x_i^{(k)} - x_j^{(k)} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (3.1)$$

onde $x_i^{(k)}$ indica a k -ésima coordenada ($k = 1, 2, 3, \dots, d$) do i -ésimo sítio ($i = 1, 2, 3, \dots, N$).

Como $\hat{D}_{ii} = 0$ e $\hat{D}_{ij} = \hat{D}_{ji}$, $\hat{\mathbf{D}}$ é uma matriz simétrica em relação à diagonal principal, sendo que todos os elementos dessa diagonal são nulos:

$$\hat{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{D}_{12} & \dots & \hat{D}_{1N} \\ \hat{D}_{12} & 0 & \dots & \hat{D}_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{D}_{1N} & \hat{D}_{2N} & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Deste modo, temos $N(N-1)/2$ distâncias aleatórias distintas. Entretanto, nem todas estas distâncias são variáveis aleatórias independentes, devido à desigualdade triangular¹ e aos efeitos de borda.

¹A desigualdade triangular pode ser definida da seguinte forma: sejam i, j e k três pontos quaisquer no espaço, então $\hat{D}_{ij} + \hat{D}_{jk} \geq \hat{D}_{ik}$.

3.1.1 Probabilidade de Vizinhança em Ambientes Poissônicos: Fórmula de Cox

O estudo da distribuição espacial de pontos foi inicialmente realizado por Clark e Evans [27, 28]. O trabalho deles foi corrigido posteriormente por Dacey [29] e generalizado por Cox [30] para uma paisagem formada por pontos distribuídos como um processo de Poisson em d dimensões. Cox obteve uma fórmula para calcular a probabilidade de um ponto J ser o n -ésimo vizinho mais próximo do ponto I , dado que I é o m -ésimo vizinho mais próximo de J :

$$p_n^{(d)}(m) = \frac{1}{1 + P_d} \left(\frac{P_d}{1 + P_d} \right)^{m+n-2} \sum_{i=0}^{\min(m-1, n-1)} \left(\frac{1 - P_d^2}{P_d^2} \right)^i \frac{(n + m - i - 2)!}{(n - i - 1)! i! (m - i - 1)!}, \quad (3.2)$$

onde:

$$P_d = \frac{2\Gamma(\frac{1}{2}d + 1)}{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma[\frac{1}{2}(d + 1)]} \int_0^{\frac{1}{2}} dx (1 - x^2)^{\frac{1}{2}(d-1)} = I_{1/4} \left(\frac{1}{2}, \frac{d + 1}{2} \right). \quad (3.3)$$

As funções gama $\Gamma(t)$ e beta incompleta $I_x(a, b)$ são definidas no Apêndice A. Este resultado, escrito em termos destas funções especiais, é bastante importante, uma vez que a função beta incompleta é bem conhecida e existem algoritmos bastante rápidos e precisos para sua implementação numérica [31].

A Fig. 1 representa a situação descrita para $d = 2$. No interior da hiperesfera centrada em I existem n pontos e no interior da hiperesfera centrada em J , m pontos. O número de pontos na intersecção das hiperesferas é i . Deste modo, a interpretação geométrica de P_d é a fração do volume de cada hiperesfera (crescente) que não faz parte da intersecção. A Tabela 1 apresenta alguns valores de P_d . Dois valores singulares chamam a atenção nesta tabela:

- o valor $P_0 = 1/3$, é um limite teórico para um sistema colapsado a um único ponto ($d = 0$). Mesmo assim, a sobreposição das hiperesferas representadas na Fig. 1 é de apenas $2/3$ e não 1, como se poderia desavisadamente imaginar; e
- o valor limite $P_\infty = 1$, indicando que, em altas dimensionalidades, praticamente não existe sobreposição das hiperesferas.

O gráfico da Fig. 2 mostra o valor de P_d partindo de $1/3$ em $d = 0$ e aumentando monotonamente, convergindo para 1 à medida que d aumenta.

A função beta incompleta é contínua em todo o domínio real e o fator P_d é responsável

Figura 1: Representação geométrica das vizinhanças para $d = 2$. J é o n -ésimo vizinho de seu próprio m -ésimo vizinho I .

d	P_d	aprox.	d	P_d	aprox.
0	$1/3$	0,33333	7	$1759/2048$	0,85889
1	$1/2$	0,50000	8	$\frac{1}{3} + \frac{279\sqrt{3}}{280\pi}$	0,88269
2	$\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2\pi}$	0,60900	9	$59123/65536$	0,90214
3	$11/16$	0,68750	10	$\frac{1}{3} + \frac{297\sqrt{3}}{280\pi}$	0,91814
4	$\frac{1}{3} + \frac{3\sqrt{3}}{4\pi}$	0,74683	11	$488293/524288$	0,93134
5	$203/256$	0,79297	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
6	$\frac{1}{3} + \frac{9\sqrt{3}}{10\pi}$	0,82953	∞	1	1

Tabela 1: Valores de P_d em função de d .

pela influência da dimensionalidade do sistema na Eq. 3.2. Dessa forma, podemos expandir os resultados de Cox para os casos de dimensionalidades fractais (não-inteiras).

3.1.2 Efeito de Borda

Em um sistema limitado, pontos localizados próximo às fronteiras têm uma quantidade menor de vizinhos, de modo que o relacionamento deles com seus vizinhos não é igual ao dos pontos localizados no interior do sistema. Podemos dizer que estes pontos periféricos estão relativamente isolados do sistema, uma vez que têm uma região de vizinhança menor. À medida que o número de dimensões aumenta, esse isolamento se torna progressivamente maior. Este efeito é conhecido como *efeito de borda*.

Consideremos um hipercubo de lado $2R$ e d dimensões como sendo o meio desordenado proposto e que seu centro seja a hipersfera inscrita nele. Para uma estimativa quantita-

Figura 2: Variação de P_d (Eq. 3.3) em função do número de dimensões do sistema.

tiva do efeito de borda, a periferia pode ser entendida como o volume do hipercubo externo à hiperesfera. Sendo $V_c = (2R)^d$ o volume do hipercubo e $V_e = \pi^{d/2} R^d / \Gamma(1 + d/2)$ o da hiperesfera [30, 32], podemos determinar a fração do sistema que corresponde à periferia do mesmo:

$$\begin{aligned}
 \frac{V_c - V_e}{V_c} &= \frac{1}{2^d R^d} \left[2^d R^d - \frac{\pi^{d/2} R^d}{\Gamma(1 + d/2)} \right] \\
 &= 1 - \frac{\pi^{d/2}}{2^d \Gamma(1 + d/2)} \\
 &= 1 - \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} \right)^d \frac{1}{\Gamma(1 + d/2)}.
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Como a razão $\sqrt{\pi}/2 < 1$, e a função $\Gamma(x)$ diverge quando $x \rightarrow \infty$, é fácil verificar que, em altas dimensionalidades, a periferia tende a ocupar todo o volume do sistema. A Fig. 3 mostra como se dá esse crescimento em função do aumento no número de dimensões do sistema. É interessante notar o crescimento abrupto dos efeitos de borda nos espaços de baixa dimensionalidade. Para sistemas tridimensionais, a borda representa cerca de 47,6% do volume. Note também que para $d \geq 10$, os efeitos de borda são dominantes.

À medida que o número de dimensões aumenta, o efeito de borda se torna mais importante. Para a reduzi-lo seria necessário aumentar muito o número de pontos, a fim de povoar a periferia.

Figura 3: Crescimento relativo da periferia de um sistema em função do aumento da dimensionalidade (Eq. 3.4). Observe que para $d \geq 10$ os efeitos de borda são dominantes.

3.1.3 Condições de Contorno

Sistemas como os descritos na seção 3.1.2 são ditos *sistemas com condições de contorno abertas*.

Uma maneira de reduzir os efeitos de borda muito comumente utilizada é conectar a origem e a extremidade de cada uma das coordenadas espaciais, tornando-as circulares. Dessa forma todos os sítios tornam-se igualmente acessíveis aos demais. Assim, ao invés de um hipercubo, obtém-se uma hipersuperfície toroidal de d dimensões. Diz-se, então, que o sistema tem *condições periódicas de contorno*.

As Figs. 4 e 5 ilustram este processo para $d = 1$ e $d = 2$, respectivamente. Deve-se observar que a circunferência da Fig. 4 é geometricamente bidimensional, mas topologicamente unidimensional. Do mesmo modo, o toróide da Fig. 5 tem três dimensões geométricas, mas é topologicamente bidimensional, pois os pontos estão distribuídos apenas sobre sua superfície. Não é possível construir figuras que ilustrem meios com condições periódicas de contorno para $d \geq 3$, mas o processo continua sendo algebricamente válido.

Vamos considerar inicialmente, o caso unidimensional.

Sejam i e j dois pontos localizados ao longo do eixo $x^{(k)}$ nas coordenadas $x_i^{(k)}$ e $x_j^{(k)}$ dentro do intervalo $[0, 1[$. Define-se a distância entre eles, ao longo do eixo $x^{(k)}$,

Figura 4: Condições abertas e periódicas de contorno em 1 dimensão.

Figura 5: Condições abertas e periódicas de contorno em 2 dimensões.

como sendo o valor absoluto da diferença entre suas coordenadas: $\hat{D}_{ij}'^{(k)} = |x_i^{(k)} - x_j^{(k)}|$. Utilizando as condições periódicas de contorno, essa distância também pode ser escrita como $\hat{D}_{ij}''^{(k)} = 1 - |x_i^{(k)} - x_j^{(k)}|$, que seria a distância “complementar” entre esses pontos. Assim, definimos a distância entre dois pontos, com condições periódicas de contorno, ao longo de um eixo como sendo a menor das distâncias entre eles ao longo desse eixo:

$$\hat{D}_{ij}^{(k)} = \min \left(|x_i^{(k)} - x_j^{(k)}|, 1 - |x_i^{(k)} - x_j^{(k)}| \right). \quad (3.5)$$

Este princípio pode ser estendido para o caso de mais de uma dimensão espacial. Assim, a distância total entre dois pontos em um sistema de d dimensões com condições periódicas de contorno será dada por:

$$\hat{D}_{ij} = \left[\sum_{k=1}^d \left(\hat{D}_{ij}^{(k)} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (3.6)$$

Com condições periódicas de contorno, temos $N(N-1)/2$ distâncias aleatórias, mas agora somente a desigualdade triangular introduz correlação entre elas.

3.1.4 Sistemas de Dimensionalidades Diferentes

Por vezes se torna necessária a comparação entre dois sistemas de diferentes dimensionalidades. Para isso, é comum considerar que a densidade de pontos no meio $\rho = N/V$

é constante, onde V é o volume do sistema. Como estamos considerando o meio como um hipercubo de lado unitário, $V = 1$, e, portanto, $\rho = N$. O volume por partícula é $v = V/N = 1/N$ e a separação típica entre as partículas é da ordem de $\ell = v^{1/d} = N^{-1/d}$. A separação típica é característica do sistema e depende de sua dimensionalidade. Através dela é possível definir uma distância escalonada²:

$$D_{ij} = \frac{\hat{D}_{ij}}{\ell} = \frac{\hat{D}_{ij}}{N^{-1/d}}, \quad (3.7)$$

com $\hat{D}_{ij}$ dada pela Eq. 3.6. Este escalonamento se mostrou importante nos problemas da caminhada estocástica do turista, tratados nas referências [33] e [34].

3.2 Caminhada Determinista do Turista

Consideremos a seguinte dinâmica de movimentação, proposta originalmente por Osame Kinouchi em 1999 [35]:

Imagine um plano que contém pontos distribuídos segundo uma densidade uniforme. Para ser pictórico, imagine que cada ponto é uma fonte de comida para uma formiga. A formiga começa num certo ponto, usando uma regra determinista de movimento: Ela deve se dirigir para o ponto mais próximo, desde que esse ponto não tenha sido visitado nas últimas τ vezes (τ é a janela de memória).

Alternativamente, podemos descrever essa dinâmica da seguinte maneira: um viajante se desloca em um meio desordenado (como o descrito na seção 3.1), partindo de um sítio inicial s_0 e movimentando-se de acordo com a regra determinista de, a cada intervalo de tempo, ir para o sítio mais próximo que não tenha sido visitado nos últimos μ passos ($0 \leq \mu \leq N$). A grandeza μ , que pode ser entendida como a memória do viajante, representa o tempo (em número de passos) necessário para a regeneração dos sítios visitados (tempo refratário). Esta regra é chamada de *regra do turista* e a caminhada parcialmente auto-repulsiva³ gerada por ela é denominada *caminhada determinista do turista*⁴ [10].

Cada sítio inicial do mapa dá origem a trajetórias diferentes. Todas as trajetórias possuem uma parte inicial transiente de tamanho t (não-periódica) e terminam invariavelmente em ciclos (atratores de período p). É interessante notar que se $\mu = N$, a

²Note que D_{ij} é uma grandeza adimensional.

³Uma caminhada é dita auto-repulsiva ('self-avoiding') quando não intercepta a si mesma, ou seja, o caminhante não pode retornar a qualquer sítio que já tenha visitado.

⁴O nome *caminhada do turista* foi proposto por Peter Stadler, durante uma visita ao Departamento de Física e Matemática (DFM) da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto (FFCLRP), em 2000. Como uma situação real, ele imaginou um mochileiro que ia visitando as cidades pedindo carona.

caminhada será totalmente auto-repulsiva e, portanto, será encerrada após uma parte transiente, com $t = N$. Já com $\mu = N - 1$, teremos uma caminhada formada por um ciclo de período $p = N$ e com transiente nulo ($t = 0$).⁵

É importante chamar a atenção para o fato de que o turista não precisa conhecer de antemão todo o sistema, visto que as distâncias podem ser calculadas à medida que ele avança na caminhada. Desta forma, a caminhada determinista do turista é um problema de otimização local, ao contrário do problema do caixeiro viajante⁶, que é um problema de otimização global.

3.2.1 A Tabela de Vizinhaça

Para seguir a regra do turista o viajante deve conhecer de antemão quais são os μ sítios mais próximos àquele em que se encontra. Para tanto, definimos a tabela de vizinhaça $\mathbf{V}_{N \times \mu}$, na qual cada elemento V_{ij} indica qual é o j -ésimo vizinho mais próximo ($1 \leq j \leq \mu$) do i -ésimo sítio:

$$\mathbf{V}_{N \times \mu} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \dots & V_{1\mu+1} \\ V_{21} & V_{22} & \dots & V_{2\mu+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{N1} & V_{N2} & \dots & V_{N\mu+1} \end{pmatrix}.$$

A tabela de vizinhaça mostra todos os caminhos disponíveis ao viajante, contendo assim toda a informação necessária para realizar a caminhada. Por isso, seu uso é mais interessante do que o da matriz de distâncias, que, devido à simetria, apresenta muita redundância.

Uma vez que o viajante conhece apenas seus μ vizinhos mais próximos, podemos entender que, se $\mu \ll N$, ele tem um apenas uma informação local do meio. Apesar disso, a dinâmica da caminhada pode levar a ciclos de período $p \gg N$, propiciando uma exploração global do sistema. Este é o principal tema desta dissertação.

Em geral, a caminhada do turista pode ser realizada em qualquer tabela de vizinhaça, uma vez que a distância não precisa ser necessariamente euclidiana, podendo ser qualquer relação de ordenação entre objetos [9, 36].

⁵A regra de movimentação neste caso é conhecida como *algoritmo "greedy"* (guloso).

⁶O *problema do caixeiro viajante* consiste em determinar o caminho mais curto (ciclo hamiltoniano) que passe por um conjunto de N cidades e retorne ao ponto de origem. Para resolvê-lo é necessário conhecer de antemão as distâncias entre todas as cidades.

3.2.2 Visualização das Caminhadas em Uma, Duas e Três Dimensões

Um dos principais problemas encontrados no início dos estudos sobre a caminhada do turista foi a visualização das trajetórias do viajante no espaço. Apesar de simples de enunciar e de entender, a regra de movimentação permite o surgimento de trajetórias complicadas em função do número de sítios, da dimensionalidade do sistema e principalmente da memória do viajante. A fim de resolver esse problema, durante o período de minha iniciação científica desenvolvi um programa computacional que permite a visualização das caminhadas em uma e duas dimensões.

A utilização da tabela de vizinhança se mostrou fundamental no desenvolvimento deste programa, uma vez que seu uso, ao invés da matriz de distâncias, reduziu a quantidade de memória necessária. Isto permitiu gerar mapas com um número grande de pontos ($N \approx 1000$). O principal problema encontrado foi detectar os ciclos que indicam o final da caminhada. Para essa finalidade, foi utilizado um vetor que continha a caminhada desde o seu início.

Para detectar os ciclos, utilizei uma janela de memória, que é a porção final desse vetor, formada pelos μ últimos sítios visitados. A cada passo, uma janela deslizante de comprimento μ percorre o vetor em busca de uma porção idêntica à janela de memória. A repetição de μ passos idênticos na caminhada implica que a caminhada encontrou, necessariamente, um ciclo, cujo comprimento (p) é a distância (em passos) entre a primeira posição da janela deslizante e sua repetição na janela de memória. A Fig. 6 ilustra o processo para $\mu = 4$. A porção anterior ao ciclo é o transiente da caminhada.

Figura 6: Esquema de detecção de ciclos na caminhada do turista pelo método de janela deslizante para $\mu = 4$. Neste caso temos um transiente de três passos e um período p .

A Fig. 7 mostra a ‘interface’ do programa desenvolvido com caminhadas em (a) uma e (b) duas dimensões. É interessante notar que, no caso unidimensional mostrado, o ciclo

da caminhada tem período $p > N$, apesar da pequena memória utilizada (Fig. 7a).

Figura 7: Interface gráfica desenvolvida para visualização das caminhadas com $N = 15$ e $\mu = 4$ em (a) uma e (b) duas dimensões. Os ciclos aparecem em destaque. Observe que os parâmetros “Número de cidades”, “dimensionalidade”, “memória” e “semente” do gerador de números aleatórios são fornecidos ao programa no canto superior direito. Abaixo apresentam-se várias opções de visualização, na linha inferior tem-se a trajetória e canto inferior direito são mostrados o tamanho do ciclo detectado e a posição do cursor.

A utilização deste programa permitiu entender melhor a evolução das caminhadas, mostrando aspectos até então desconhecidos, como a existência de ciclos persistentes, que não se alteram quando a memória varia dentro de uma faixa de valores.

Durante o período de meu Mestrado, o programa foi adaptado para permitir a visualização de caminhadas em espaços tridimensionais sob diversos pontos de vista através da rotação em torno dos eixos. A figura 8 apresenta a ‘interface’ mostrando a mesma caminhada sob dois pontos de vista diferentes.

3.2.3 O Grafo do Turista

Outra forma de entender a tabela de vizinhanças é vê-la como um grafo orientado, em que os nodos representam os sítios e os arcos são as ligações entre os vizinhos mais próximos. Estes arcos são orientados na direção do deslocamento do turista e ponderados por números inteiros que indicam a ordem de distância entre os vários arcos que saem do mesmo nodo. De cada nodo saem $\mu > 0$ arcos⁷ que indicam os possíveis deslocamentos do

⁷Não estamos considerando o caso de $\mu = 0$, uma vez que o viajante não pode permanecer no sítio durante o intervalo de tempo seguinte.

Figura 8: Interface gráfica mostrando a mesma caminhada em um espaço tridimensional sob dois pontos de vista diferentes. O ciclo aparece em destaque.

turista a partir do sítio representado pelo ponto em que ele se encontra. Seguindo a regra do turista, o viajante escolhe o arco com menor peso que o leve a um sítio que ainda não tenha sido visitado nos μ passos precedentes. Este grafo é denominado *grafo do turista*.

É interessante notar que, no grafo do turista, a quantidade de arcos que partem de cada nodo (k_{out}) é fixa (de modo que quantidade total de arcos no grafo é $N\mu$, que é o número de elementos da tabela de vizinhança), entretanto a quantidade de arcos que chegam a cada nodo (k_{in}) é variável. Assim, a distribuição de k_{out} é simplesmente dada por:

$$P(k_{out}) = \delta_{k_{out}, \mu},$$

onde $\delta_{i,j}$ é o delta de Kronecker⁸. Já a distribuição de k_{in} segue uma distribuição binomial, com média e variância dadas por [37]:

$$\begin{aligned} E(k_{in}) &= \mu + 1, \\ \text{Var}(k_{in}) &= \frac{\mu + 1}{2}. \end{aligned}$$

Estes resultados não puderam ser demonstrados analiticamente, entretanto foram verificados numericamente, com o uso de condições periódicas de contorno.

Como a distribuição de k_{in} depende de μ , algumas situações interessantes podem

⁸O delta de Kronecker é definido por:

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq j, \\ 1 & \text{se } i = j, \end{cases}$$

e constitui uma representação discreta da função delta de Dirac, definida no Apêndice A.

ocorrer quando alteramos o tamanho da memória, como mostrado a seguir.

3.2.4 Turista Preguiçoso

O caso mais simples a ser considerado é o do turista preguiçoso, no qual $\mu = 0$. Neste caso, podemos considerar a tabela de vizinhança como uma tabela de uma única coluna, em que $V_{i1} = i$. Assim, o viajante fica preso no sítio inicial, de tal forma que o transiente é sempre nulo⁹. Neste caso, a distribuição dos tempos de transiente é simplesmente $S_{0,d}(t) = \delta_{t,0}$ e todos os sítios são atratores de período unitário do sistema. A distribuição de atratores $P_{\mu,d}(p)$ é dada por $P_{0,d}(p) = \delta_{p,1}$, e a probabilidade $p_{\mu,d}(1)$ de que o viajante entre em um atrator no primeiro passo é $p_{0,d}(1) = 1$.

Apesar da trivialidade deste caso, ele se torna interessante por ser a situação mais simples da caminhada *estocástica* do turista, tratada na referência [33], mas que não será objeto de estudo nesta dissertação.

Como veremos, o caso $\mu = 0$ pode ser resolvido analiticamente e apresenta soluções não triviais para uma aproximação de campo médio.

3.2.5 Turista sem Memória

No caso em que $\mu = 1$, a tabela de vizinhança se torna um vetor coluna e o turista passa a conhecer a cidade mais próxima de onde se situa¹⁰. Dessa forma, ele é obrigado, a cada passo, a deixar o sítio em que se encontra e mover-se até o sítio mais próximo dentre os demais. A denominação *turista sem memória* se deve ao fato de que, a cada passo, ele conhece apenas do sítio em que está, mas não se “lembra” de nenhum dos sítios visitados nos passos anteriores. Assim, a caminhada sempre termina quando o turista encontra dois sítios que são mutuamente mais próximos. Isto acontece quando $V_{i1} = j$ e $V_{j1} = i$. Estes pontos formam um *casal*. Os casais são os atratores do sistema. Portanto, a distribuição de períodos sempre vale $P_{1,d}(p) = \delta_{p,2}$, ou seja, todos os ciclos têm período dois.

A fração de casais em uma população de N pontos corresponde à densidade de atratores de período dois na caminhada do turista. Podemos definir a densidade de ciclos de período p para uma determinada memória μ , em função da dimensão d do sistema $[D_{\mu,d}(p)]$, como a razão entre o número de ciclos com período p e o número de pontos N

⁹Podemos entender este caso como um grafo do turista sem arcos, ou com um arco que liga cada nodo a si mesmo. Em qualquer um dos casos, o turista fica preso no mesmo sítio.

¹⁰No grafo do turista, para este caso, cada nodo tem apenas um arco de saída que aponta para o vizinho mais próximo.

do sistema. Para $\mu = 1$ os únicos ciclos permitidos são os de período $p = 2$.

Na Eq. 3.2, fazendo $m = n = 1$, temos:

$$p_1(1) = (1 + P_d)^{-1} = \left[1 + I_{1/4} \left(\frac{1}{2}, \frac{d+1}{2} \right) \right]^{-1}, \quad (3.8)$$

que é a probabilidade de um ponto qualquer ser o primeiro vizinho de seu próprio primeiro vizinho. O número de pontos que satisfazem essa condição é $N/\{1 + I_{1/4}[1/2, (d+1)/2]\}$. Como cada ciclo é formado por dois pontos, o número de ciclos é $N/\{2[1 + I_{1/4}(1/2, (d+1)/2)]\}$. Assim, densidade de ciclos de período $p = 2$ é:

$$D_{1,d}(2) = \left\{ 2 \left[1 + I_{1/4} \left(\frac{1}{2}, \frac{d+1}{2} \right) \right] \right\}^{-1}. \quad (3.9)$$

Este resultado permite determinar a densidade de casais em função da dimensionalidade do sistema. A Tabela 2 mostra o valor de $D_{1,d}(2)$ em função da dimensionalidade, calculados a partir dos dados da Tabela 1.

d	$D_{1,d}(2)$	aprox.	d	$D_{1,d}(2)$	aprox.
0	$3/8$	0,37500	7	$1024/3807$	0,26898
1	$1/3$	0,33333	8	$\frac{420\pi}{837\sqrt{3}+1120\pi}$	0,26558
2	$\frac{3\pi}{8\pi+3\sqrt{3}}$	0,31075	9	$32768/124659$	0,26286
3	$8/27$	0,29630	10	$\frac{420\pi}{891\sqrt{3}+1120\pi}$	0,26067
4	$\frac{6\pi}{9\sqrt{3}+16\pi}$	0,28623	11	$262144/1012581$	0,25889
5	$128/459$	0,27887	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
6	$\frac{15\pi}{27\sqrt{3}+40\pi}$	0,27329	∞	$1/4$	0,25000

Tabela 2: Densidade de casais $[D_{1,d}(2)]$ em função da dimensionalidade do sistema (d).

É interessante notar o valor $D_{1,d}(2) = 3/8$ que indica o limite teórico para um sistema colapsado a um único ponto. Neste caso, poderia se esperar que todos os pontos fizessem parte de casais, mas apenas $3/4$ deles o fazem.

A Fig. 9 mostra $D_{1,d}(2)$ diminuindo monotonamente em função de d e convergindo assintoticamente para $1/4$. O gráfico mostra um decrescimento rápido para $0 \leq d \leq 10$ e mais lento para $d > 10$.

Dessa forma temos que $D_{1,d}(2) \in]1/4, 3/8]$ para $d \in [0, \infty[$. Como o domínio é um intervalo contínuo, podemos determinar a densidade de casais em ambientes de dimensionalidade fractal.

A distribuição dos tempos de transiente em função da dimensionalidade do sistema é

Figura 9: Densidade de casais em função da dimensionalidade do sistema.

dada por [38]:

$$S_{1,d}(t) = \frac{\Gamma(1 + P_d^{-1})(t + P_d^{-1})}{\Gamma(t + 2 + P_d^{-1})}, \quad (3.10)$$

onde P_d é dado pela Eq. 3.3.

3.2.6 Turista com Memória

Os casos em que $\mu \geq 2$ diferem drasticamente dos anteriores, principalmente quanto à distribuição dos ciclos. Para $\mu = 0$ ou 1 , a distribuição de ciclos com período p é $P_{\mu,d}(p) = \delta_{p,\mu+1}$. Já para $\mu \geq 2$, o menor período permitido para um ciclo é $p = \mu + 1$, enquanto que o maior período possível é da ordem de N . Uma vez que é possível a existência de períodos longos, pode-se esperar que um caminhante com uma memória pequena ($\mu \ll N$) seja capaz de explorar todo o mapa.

De fato, um dos principais objetivos deste trabalho consiste em determinar se existe ou não uma memória crítica com a qual o viajante passe de “explorador local” para “explorador global” em sistemas unidimensionais. Isto será feito no Capítulo 4.

Gilson F. Lima et al. [10] mostraram que, para $\mu/N \ll 1$, a distribuição dos tempos do transiente $S_{\mu,d}(t) \propto \exp[-t/\xi(\mu)]$, com o tempo de $\xi(\mu)$ decaimento aumentando exponencialmente para $d = 1$ e linearmente para $d = 2$. Além disso, a densidade de ciclos com período p , $D_{\mu,d}(p)$, aparentemente não segue nem uma exponencial nem uma lei de potência para $d = 1$, enquanto que para $d = 2$ segue uma lei de potência: $D_{\mu,2}(p) \propto p^{-\alpha(\mu)}$

quando $\mu \gg 1$. O expoente α se torna independente de μ para $\mu/N \ll 1$ [10].

Outro resultado interessante para o caso do turista com memória é a proibição de ciclos com períodos ímpares maiores que $p = 3$ e dos períodos $p = 6$ para $d = 1$ e $\mu = 2$ [10, 37].

Um estudo preliminar realizado por Wilnice T. R. Oliveira e César A. S. Terçariol indica que a proibição de ciclos em uma dimensão não ocorre apenas para $\mu = 2$, mas que, aparentemente, todos os ciclos com $p \in \{2\mu + 1, 2\mu + 2, 2\mu + 3\}$ são proibidos¹¹.

3.3 Modelos de Campo Médio

A aproximação de campo médio consiste em fazer com que cada ponto da rede interaja com a mesma intensidade com todos os demais sítios do sistema. Vamos apresentar aqui dois sistemas que apresentam essa característica: o modelo de distâncias aleatórias (*random link*) e o de mapeamento aleatório (*random map*). O primeiro é o limite natural para altas dimensionalidades do problema da caminhada do turista. O segundo é o único caso resolvido analiticamente que apresenta uma distribuição não-trivial de ciclos, mesmo nos casos do turista preguiçoso ou do turista sem memória. Ambos os modelos apresentados foram estudados no contexto da caminhada do turista na referência [38].

3.3.1 Modelo de Distâncias Aleatórias

À medida que o número de dimensões do espaço euclidiano aumenta, as correlações entre as distâncias (como a desigualdade triangular) enfraquecem. Quando $d \rightarrow \infty$, estas correlações podem ser desprezadas e as distâncias entre os pontos podem ser consideradas variáveis aleatórias independentes. Entretanto, a simetria entre as distâncias de ida e volta $\hat{D}_{ij} = \hat{D}_{ji}$ deve ser mantida. Este modelo é conhecido como *random link* e foi proposto originalmente por Mézard e Parisi [39] e posteriormente explorado por Percus e Martin [40].

Neste modelo, a distribuição dos tempos de transiente para a caminhada do turista sem memória pode ser obtida tomando P_d na Eq. 3.10 no limite $d \rightarrow \infty$:

$$S_{1,rl}(t) = \frac{t+1}{(t+2)!}. \quad (3.11)$$

¹¹Indicações a este respeito foram encontradas recentemente durante simulações numéricas em mapas com condições periódicas de contorno.

3.3.2 Modelo de Mapeamento Aleatório

Se tomarmos o modelo de distâncias aleatórias e retirarmos a restrição da simetria entre as distâncias de ida e volta, teremos um modelo em que todas as distâncias estarão descorrelacionadas. Este é o de modelo de distâncias aleatórias assimétricas. A única restrição restante é que a distância de um ponto a si mesmo é nula ($\hat{D}_{ii} = 0$). Derrida e Flyvbjerg [41] estudaram uma variante deste modelo, removendo esta restrição. O modelo resultante é conhecido como *mapeamento aleatório* ou *random map*.

Permitindo que a distância de um ponto a si mesmo seja diferente de zero, cria-se o modelo mais descorrelacionado possível. Assim, um mapa de N pontos terá N^2 distâncias aleatórias independentes. A matriz de distâncias para este modelo não é simétrica e nem apresenta a diagonal principal nula, como a do meio em que se desenvolve a caminhada do turista. Entretanto, pode-se aplicar a dinâmica da caminhada do turista também no modelo de mapeamento aleatório. Ao invés de gerar uma matriz de distância aleatórias, pode-se gerar diretamente a tabela de vizinhança, na qual cada um dos μ vizinhos mais próximos é escolhido aleatoriamente, com probabilidade uniforme, entre os N pontos do mapa, sem reposição.

Ao contrário dos casos apresentados anteriormente, neste caso o turista preguiçoso pode não existir, uma vez que não existe mais a exigência dele ficar aprisionado no próprio sítio. Dessa forma, podemos ter distribuições não triviais de tempos de transientes e de ciclos mesmo com $\mu = 0$. De fato, a distribuição conjunta dos tempos de transiente e do período dos ciclos, para um mapa aleatório com N pontos, é [38]:

$$S_{0,rm}^{(N)}(t, p) = \frac{\Gamma(N)}{\Gamma[N + 1 - (t + p)]N^{t+p}}. \quad (3.12)$$

Atualmente, César A. S. Terçariol e Felipe M. Kiipper estão estudando as fórmulas de Cox aplicadas aos modelos de campo médio.

3.4 Conclusão

Neste capítulo apresentamos uma revisão sobre os métodos de estudo e os resultados para uma dinâmica determinista de movimentação em um meio desordenado. Esta dinâmica determinista parcialmente auto-repulsiva é chamada de caminhada do turista.

Inicialmente, caracterizamos o meio desordenado através de sua estatística de vizinhanças. Apresentamos um estudo analítico do efeito de borda e mostramos uma forma

de reduzi-lo através da utilização de condições periódicas de contorno.

Em seguida, descrevemos os aspectos dinâmicos da caminhada, apresentando o grafo do turista. A conectividade do grafo do turista e os pesos atribuídos a cada arco dependem da memória do caminhante, sendo esta, em última análise, responsável por toda a dinâmica da caminhada.

A utilização de um programa computacional, desenvolvido durante minha iniciação científica e aprimorado durante meu Mestrado, permitiu entender melhor a evolução da caminhada do turista em baixa dimensionalidade, mostrando aspectos até então desconhecidos.

Mostramos também algumas situações interessantes que podem ocorrer quando se altera a memória do viajante e, portanto, a conectividade do grafo do turista, dando especial ênfase às distribuições conjuntas dos tempos de transiente e dos períodos dos ciclos em função da memória e da dimensão do sistema. A possibilidade de obter ciclos longos nos casos em que $\mu \geq 2$ permite-nos levantar a seguinte questão: existirá uma memória crítica $\mu_d \ll N$ a partir da qual o viajante poderá explorar todo o meio?

Finalmente, apresentamos resumidamente dois modelos de campo médio: o *random link*, que representa o limite do modelo para espaços de altas dimensionalidades e o *random map*, que foi o único modelo em que foi possível obter uma distribuição não trivial de ciclos.

4 *Transição de Percolação em Sistemas Unidimensionais*

4.1 Meio Desordenado

No Capítulo 3 definimos um modelo de meio desordenado formado por sítios aleatoriamente distribuídos em um hipercubo d -dimensional. Um meio desordenado também pode ser modelado de outra forma. Consideremos uma rede regular hipercúbica em $\mathbb{Z}^d$, onde as conexões entre cada um dos N sítios da rede e seus $2d$ primeiros vizinhos, supondo um sistema d -dimensional com condições periódicas de contorno, podem estar ligadas com probabilidade p ou desligadas com probabilidade $q = 1 - p$, independentemente do estado das demais ligações [42]. A probabilidade de encontrar a rede em um estado com n_a ligações abertas é dada pela distribuição binomial $P_p(n_a) = k p^{n_a} (1 - p)^{n - n_a}$, onde o fator $k = \binom{n}{n_a}$ mede a degenerescência desse estado e $n = dN$ é o número total de ligações na rede. Note que, embora cada ponto tenha $2d$ primeiros vizinhos, o número total de conexões é dN , dado que cada conexão é contada uma única vez.

É fácil perceber que a quantidade de ligações abertas na rede depende diretamente de p . De fato, o valor esperado de n_a é $\langle n_a \rangle = np$. A Fig. 10 mostra o meio descrito em uma rede de 40×40 pontos para (a) $p = 0,25$ e (b) $p = 0,50$.

O meio assim formado pode ser entendido como um grafo aleatório, em que os nodos representam os sítios e os arcos, as ligações abertas. Dois sítios i e j estarão conectados ($i \leftrightarrow j$) se existir entre eles um caminho formado por ligações abertas. O conjunto de todos os sítios conectados (direta ou indiretamente) ao sítio i , representado por $C(i)$, forma um *aglomerado aberto*. O número de pontos que formam o aglomerado aberto $C(i)$ é representado por $|C(i)|$.

Consideremos agora que o meio em questão se estenda infinitamente em todas as direções do espaço. Neste caso diremos que houve *percolação* quando encontrarmos, com probabilidade não-nula, um aglomerado aberto com tamanho infinito. Este modelo é

Figura 10: Meio desordenado bidimensional formado por ligações aleatórias em uma rede homogênea de 40×40 pontos com (a) $p = 0,25$ e (b) $p = 0,50$. As linhas indicam as ligações abertas.

conhecido por *percolação de ligações independentes*.

Uma outra forma de estudar este processo consiste em considerar os vértices da rede como sítios que podem estar ocupados com probabilidade p ou desocupados com probabilidade $q = 1 - p$. Neste modelo, consideramos que todas as conexões entre os sítios estão ligadas. Um aglomerado é definido como um agrupamento dos sítios vizinhos mais próximos ocupados. Da mesma forma que no modelo anterior, a quantidade de sítios ocupados depende diretamente do valor de p . A Fig. 11 mostra o meio descrito em uma rede de 40×40 pontos para (a) $p = 0,25$ e (b) $p = 0,50$.

Considerando que este meio se estenda infinitamente em todas as direções do espaço, diremos que houve percolação de *sítios independentes* se encontrarmos, com probabilidade não-nula, um aglomerado de tamanho infinito.

4.2 Transição de Percolação

Historicamente, o conceito de percolação surge do estudo do fenômeno de transporte de um fluido através de um meio poroso, como, por exemplo, o petróleo através de uma rocha, ou a água em um filtro de areia.

Proposto no final da década de 1950 por Broadbent e Hammersley [43, 44], o modelo

Figura 11: Meio desordenado bidimensional formado por ocupações aleatórias dos sítios de uma rede homogênea de 40×40 pontos com (a) $p = 0,25$ e (b) $p = 0,50$. As células escuras indicam os sítios ocupados.

de percolação descreve o meio poroso como uma rede de canais aleatórios, por onde escoar um fluido determinista. Este processo é diferente da difusão, onde um fluido aleatório se move por um meio determinista [44]. Modelos de percolação encontram aplicação em várias situações físicas de interesse tais como o problema da mecânica estatística de sistemas ferromagnéticos diluídos [45], no problema do transporte de corrente elétrica através de uma rede composta por um grande número de resistores não ordenados [46], em problemas de prospecção de petróleo [47] e até mesmo na propagação de epidemias e de incêndios florestais [48].

Define-se a *probabilidade de percolação* $\theta(p)$ como sendo a probabilidade de um dado sítio pertencer a um aglomerado infinito¹:

$$\theta(p) = P_p[C(i) = \infty].$$

Como o aumento da probabilidade de ligações p implica no aumento do número de sítios conectados n_a e, portanto, no aumento de $\theta(p)$, uma vez que mais caminhos estarão disponíveis, podemos concluir que $\theta(p)$ é uma função não decrescente de p . Além disso, com $p = 1$, todos os sítios estão conectados entre si e temos um único aglomerado infinito, ou seja, $\theta(p) = 1$. Quando $p = 0$, não existem ligações abertas e, portanto, $\theta(p) = 0$. Se

¹Alternativamente podemos dizer que é a probabilidade de um sítio i estar conectado ao infinito ($i \leftrightarrow \infty$). Embora o argumento apresentado a seguir se aplique ao modelo de percolação de ligações, o mesmo também pode ser utilizado, com poucas mudanças, para o modelo de percolação de sítios.

tomarmos p e formos aumentando lentamente seu valor a partir de $p = 0$, veremos que, inicialmente teremos apenas aglomerados finitos e, dessa forma, $\theta(p) = 0$. Entretanto, em um determinado valor $p = p_c$, ocorrerá o aparecimento do primeiro aglomerado infinito. Para os valores de p gradativamente maiores que p_c , teremos uma probabilidade de percolação cada vez maior. O valor $p = p_c$ que provoca uma mudança de estado da rede:

- para $p < p_c$ a rede apresenta apenas aglomerados finitos ($\theta(p) = 0$), e
- para $p > p_c$ a rede apresenta aglomerados infinitos ($\theta(p) > 0$)

é chamado de *probabilidade crítica*.

Esta mudança de estado da rede é análoga a uma transição de fase, como quando a água passa do estado líquido para o de vapor no ponto crítico, ou quando um material ferromagnético se torna paramagnético sob a ação da temperatura.

A Fig. 12 mostra como $\theta(p)$ varia em função de p .

É interessante notar que, para $d = 1$, a única forma de obter um aglomerado infinito é com $p = 1$, ou seja, a transição de percolação para sistemas unidimensionais é nula. Como $0 < p_c < 1$, podemos concluir que não existe transição de fase de percolação de ligações independentes entre primeiros vizinhos com $d = 1$. Uma demonstração desta propriedade pode ser encontrada na referência [44].

Figura 12: Variação da probabilidade de percolação $\theta(p)$ em função de p . O ponto p_c indica a probabilidade crítica, onde ocorre a transição de fase.

4.3 Caminhada do Turista em Sistemas Unidimensionais

Consideremos um meio desordenado unidimensional como o descrito no Capítulo 3. Os N sítios são distribuídos ao longo de um segmento de reta de comprimento unitário. Deste modo, é possível ordená-los, rotulando cada um em função da sua distância à origem. Assim, o sítio $i = 1$ é o mais próximo da origem e o sítio $i = N$ o mais distante.

Tomando o sítio $i = 1$ como ponto de partida, um viajante decide explorar o meio utilizando a dinâmica do turista. Considerando a distribuição dos sítios e a memória do viajante, a trajetória pode ocorrer de três maneiras distintas:

- o viajante pode retornar ao local de partida, sem ter atingido o sítio mais distante do sistema; ou
- ele pode ficar preso em um ciclo no interior do sistema, sem nem atingir o sítio mais distante e nem retornar ao início da caminhada; ou ainda,
- ele pode atingir o sítio mais distante do sistema.

Podemos entender estas trajetórias como as de um fóton que se move no interior de um meio estratificado, não absorvente nem fluorescente, formado por placas de faces paralelas. A interface entre cada par de placas apresenta duas faces e cada uma delas pode ser transparente ou refletora, independentemente uma da outra. O fóton penetra no sistema pela face da placa mais externa e avança em direção à extremidade, desde que encontre apenas faces transparentes, emergindo na outra extremidade do sistema. Neste caso, dizemos que o fóton foi transmitido através do sistema. Se uma das faces for refletora, ele muda de sentido e retorna rumo à face de entrada, saindo do sistema pela mesma interface por onde entrou. Neste caso dizemos que o fóton foi refletido pelo sistema. Entretanto, se o meio entre as placas for absorvente, existe uma probabilidade não nula de que o fóton seja absorvido pelo meio. Neste caso, ele não é transmitido nem refletido.

A Fig. 13 ilustra as três trajetórias descritas para a caminhada do turista. Por analogia ao exemplo do fóton no meio estratificado, podemos dizer que, no primeiro caso, Fig. 13 (a), o viajante foi “refletido”; no segundo caso, Fig. 13 (b), que ele foi “absorvido” e, no terceiro caso, Fig. 13 (c), que ele foi “transmitido”. Em comparação com o modelo de percolação de ligações independentes, podemos dizer que neste último caso ocorreu uma percolação.

Figura 13: As três possibilidades de trajetória na caminhada do turista em um sistema unidimensional: (a) reflexão, (b) absorção e (c) transmissão.

4.4 Algoritmo Numérico

Para realizar a caminhada do turista no computador e considerar o número de viajantes refletidos, absorvidos e transmitidos, considere o seguinte algoritmo:

1. inicializar os vetores $N_A(1 : N - 1)$, $N_R(1 : N - 1)$ e $N_T(1 : N - 1)$ com o valor 0;
2. repetir M vezes:
 - (a) gerar um mapa aleatório com N pontos;
 - (b) rotular os pontos em ordem crescente de acordo com sua distância à origem;
 - (c) determinar a tabela de vizinhos, utilizando $\mu = N - 1$;
 - (d) para cada valor de $\mu \in [1, N - 1]$:
 - i. iniciar a caminhada a partir do ponto 1;
 - ii. a cada passo verificar na tabela de vizinhos o primeiro ponto não visitado nos últimos μ passos:
 - se o próximo ponto for o ponto 1, ocorreu reflexão: $N_R(\mu) \leftarrow N_R(\mu) + 1$ e a caminhada termina.
 - se o próximo ponto for o ponto N , ocorreu transmissão: $N_T(\mu) \leftarrow N_T(\mu) + 1$ e a caminhada termina.
 - verificar se a caminhada atingiu um ciclo:
 - caso verdadeiro, ocorreu absorção: $N_A(\mu) \leftarrow N_A(\mu) + 1$ e a caminhada termina.

– caso contrário, a caminhada avança um passo;

Como saída, o algoritmo fornece três vetores:

- $N_R(1 : N - 1)$ armazena a quantidade total caminhadas que terminaram por reflexão para cada valor de $\mu \in [1, N - 1]$;
- $N_A(1 : N - 1)$ armazena a quantidade total caminhadas que terminaram por absorção para cada valor de $\mu \in [1, N - 1]$; e
- $N_T(1 : N - 1)$ armazena a quantidade total caminhadas que terminaram por transmissão para cada valor de $\mu \in [1, N - 1]$.

É interessante notar que $N_R(\mu) + N_A(\mu) + N_T(\mu) = M$, $\forall \mu \in [1, N - 1]$.

Dessa forma, podemos definir os índices de reflexão, de absorção e de transmissão em função de μ :

$$\begin{aligned} I_R(\mu) &= \frac{N_R(\mu)}{M}, \\ I_A(\mu) &= \frac{N_A(\mu)}{M}, \\ I_T(\mu) &= \frac{N_T(\mu)}{M}. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Como estas grandezas estão normalizadas, $I_R(\mu) + I_A(\mu) + I_T(\mu) = 1$, $\forall \mu \in [1, N - 1]$.

4.5 Transmissão na Caminhada do Turista Unidimensional

Na Seção 4.2, mostramos que não ocorre transição de fase de percolação de ligações independentes entre primeiros vizinhos em sistemas unidimensionais. Entretanto, como mostrado na Seção 4.3, a caminhada do turista em sistemas unidimensionais apresenta um comportamento similar à percolação, embora, neste caso, a probabilidade θ do viajante atravessar o sistema não depende da probabilidade p de ligação entre sítios, mas da memória μ do viajante.

Como discutido no Capítulo 3, quando $\mu = 0$, temos a situação do turista preguiçoso, na qual todos os pontos são atratores do sistema. Neste caso, o turista não consegue escapar do ponto de origem da caminhada e toda sua exploração se limita a um único ponto e tem-se reflexão total ($I_R = 1$).

Quando $\mu = 1$, temos o caso do turista sem memória. Neste caso, a caminhada ocorre até que o turista encontre um par de sítios que são primeiros vizinhos mútuos (casal),

onde fica aprisionado. Aqui, o sucesso em explorar o ambiente depende da distribuição dos pontos no sistema:

- se o ponto de origem fizer parte de um casal, o turista explorará apenas dois pontos, sendo imediatamente refletido; de acordo com a Eq. 3.11, a probabilidade de ocorrência deste evento vale $S_{1,1}(0) = 2/3$;
- se o primeiro casal encontrado estiver no interior do sistema, o turista será absorvido após explorar $t+2$ pontos, onde t é o comprimento da parte transiente da caminhada;
- se houver apenas um casal no sistema e ele estiver localizado na extremidade do mesmo, o turista será transmitido através do sistema, tendo explorado todos os pontos; a probabilidade de ocorrer este evento é $S_{1,1}(t \geq N-2) = 1/(N-1)!$.

Considerando que em um sistema unidimensional com N pontos a quantidade de pontos que fazem parte de casais é $2ND_{1,1}(2) = 2N/3$, com $D_{1,1}(2)$ dada pela Eq. 3.9, a probabilidade de ocorrer a terceira situação acima é praticamente nula para $N \gg 1$.

Por outro lado, quando $\mu = N$, a caminhada se torna totalmente auto-repulsiva e o turista percorre todos os pontos do sistema, porém sem o aparecimento de um ciclo. Na condição de $\mu = N-1$ o turista também percorre todos os pontos do sistema, mas neste caso temos um ciclo com período $p = N$. Estes são dois casos particulares do turista com memória em que se tem transmissão total ($I_T = 1$).

Uma vez que para μ da ordem de 1 o coeficiente de transmissão é praticamente nulo e que para μ da ordem de N o coeficiente de transmissão é praticamente unitário, pode-se esperar que a curva do coeficiente de transmissão em função da memória tenha um comportamento monotonamente crescente e que possivelmente exista um valor de memória μ_1 , $0 < \mu_1 < N-1$, que provoque uma mudança no comportamento exploratório do turista:

- para $0 \leq \mu < \mu_1$, o turista é refletido ou absorvido pelo sistema, de modo que sua exploração é apenas local, e
- para $\mu_1 \leq \mu \leq N-1$, o turista é transmitido através do sistema, transformando-se em um explorador global.

Este valor μ_1 pode ser considerado como uma *memória crítica*, que produz uma transição de fase no modelo da caminhada do turista unidimensional similar à transição de percolação.

A Fig. 14 mostra o resultado obtido pelo algoritmo descrito na Seção 4.4 para os valores iniciais $M = 10000$ e $N = 1000$. O comportamento mostrado pelos índices de reflexão, de absorção e de transmissão são observados para quaisquer valores de $N \gg 1$. O aumento de M permite suavizar as curvas, entretanto aumenta o tempo de processamento do algoritmo.

Figura 14: Variação dos índices de reflexão (círculos), absorção (triângulos) e transmissão (quadrados) para a caminhada do turista em sistemas unidimensionais em função de μ . Estas curvas foram obtidas para $M = 10000$ mapas com $N = 1000$ pontos.

Pelo gráfico da Fig. 14, vemos que o coeficiente de transmissão muda abruptamente para um valor μ_1 bem definido de memória.

4.6 Dedução Analítica do Índice de Transmissão em Função da Memória

Consideremos um meio semi-infinito formado por infinitos pontos distribuídos aleatoriamente e de forma uniforme sobre uma semi-reta, com separação média ℓ entre eles. Embora seja ilimitado, este meio é similar ao meio desordenado onde ocorre a caminhada do turista.

O meio assim formado pode ser descrito como um processo de Poisson unidimensional, no qual os sítios podem ser considerados eventos que ocorrem aleatoriamente no espaço e sem memória dos sítios anteriores. Dessa forma, a distância s entre dois sítios consecutivos

segue uma distribuição exponencial, cuja pdf é:

$$f(s) = \begin{cases} \frac{e^{-s/\ell}}{\ell}, & \text{se } s \geq 0 \\ 0, & \text{se } s < 0 \end{cases}. \quad (4.2)$$

A Fig. 15 ilustra o meio descrito.

Figura 15: Meio desordenado unidimensional semi-infinito.

Para que um caminhante, partindo do ponto x_1 mais próximo da origem, consiga percorrer N pontos desse meio, sem mudar de sentido (caminhada persistente), utilizando a dinâmica de movimentação da caminhada do turista com memória μ , é necessário que:

- os primeiros μ passos tenham qualquer comprimento, uma vez que a própria dinâmica da caminhada impede o caminhante de retornar aos últimos μ sítios visitados, ou seja, $0 \leq s_k < \infty$, com $k = 1, 2, 3, \dots, \mu$;
- os passos de ordem $\mu + 1$ a $N - 1$ devem ser, cada um deles, menores que os μ passos que os precederam, ou seja, $0 \leq s_k < \sum_{j=k-\mu}^{k-1} s_j$, com $k = \mu + 1, \mu + 2, \dots, N - 1$.

Considerando que os comprimentos dos passos são variáveis aleatórias independentes, a probabilidade de que um determinado passo s tenha comprimento entre s_a e s_b é dado por $\int_{s_a}^{s_b} ds f(s)$. É possível, então, determinar a probabilidade de que o caminhante percorra N sítios sem mudar de sentido, para uma determinada memória μ :

$$P(N|\mu) = \left[\int_0^\infty ds \frac{e^{-s/\ell}}{\ell} \right]^\mu \prod_{k=\mu+1}^{N-1} \int_0^{\sum_{j=k-\mu}^{k-1} s_j} ds \frac{e^{-s/\ell}}{\ell}. \quad (4.3)$$

O fator entre colchetes vale 1. Para calcular as integrais no produtório, vamos definir a variável $y = e^{-s/\ell}$. Dessa forma, $dy/ds = -e^{-s/\ell}/\ell$ e os limites de integração são $e^0 = 1$ e $e^{-\sum_{j=k-\mu}^{k-1} s_j/\ell} = \prod_{j=k-\mu}^{k-1} y_j$. Assim, a Eq. 4.3 passa a ser escrita como:

$$P(N|\mu) = \prod_{k=\mu+1}^{N-1} \left[- \int_1^{\prod_{j=k-\mu}^{k-1} y_j} dy \right] = \prod_{k=\mu+1}^{N-1} \left[\int_{\prod_{j=k-\mu}^{k-1} y_j}^1 dy \right] = \prod_{k=\mu+1}^{N-1} \left[1 - \prod_{j=k-\mu}^{k-1} y_j \right].$$

Para calcular o produtório entre colchetes, vamos utilizar uma aproximação do tipo campo médio. Para tal, considera-se que todos os fatores são iguais ao valor médio da variável

y. Dessa forma, $\prod_{j=k-\mu}^{k-1} y_j = \langle y \rangle^\mu$ e, finalmente:

$$P(N|\mu) = \prod_{k=\mu+1}^{N-1} (1 - \langle y \rangle^\mu) = (1 - \langle y \rangle^\mu)^{N-\mu-1}. \quad (4.4)$$

Uma vez que se conhece a relação entre y e s e a pdf de s , é possível determinar, aplicando a *lei fundamental de transformação de probabilidades*, a distribuição de y e, conseqüentemente, seu valor médio:

$$g(y) = f(s) \left| \frac{ds}{dy} \right|. \quad (4.5)$$

Sendo $y = e^{-s/\ell}$, então $s = -\ell \ln y$ e $ds/dy = -\ell/y = -\ell/e^{-s/\ell}$. Assim,

$$g(y) = \frac{e^{-s/\ell}}{\ell} \left| -\frac{\ell}{e^{-s/\ell}} \right| = 1,$$

e como $0 \leq s < \infty$, tem-se $0 < y \leq 1$. Assim, podemos concluir que y tem uma distribuição uniforme, entre 0 e 1 e, portanto, $\langle y \rangle = 1/2$. Dessa forma, podemos escrever, finalmente:

$$P(N|\mu) = (1 - 2^{-\mu})^{N-\mu-1}. \quad (4.6)$$

Esta dedução foi originalmente proposta por César A. S. Terçariol.

A probabilidade de um caminhante percorrer N pontos sem mudar de direção corresponde ao índice de transmissão na caminhada do turista em um mapa com N pontos, isto é,

$$I_T(\mu) = P(N|\mu). \quad (4.7)$$

Então, é possível comparar a curva do índice de transmissão da Fig. 14 com a Eq. 4.6. A Fig. 16 mostra essa comparação para $M = 10000$ mapas com $N = 10, 100$ e 1000 pontos. Pode-se notar claramente as curvas se tornam mais próximas à medida que N aumenta.

Na Fig. 17(a), tem-se uma visão tridimensional da variação de I_T em função de N e de μ , obtida para $M = 10^5$ mapas para cada valor de N . A Fig. 17(b) apresenta uma visão superior do gráfico da Fig. 17(a), destacando as curvas de nível do índice de transmissão. Nesta figura é possível observar claramente a transição da caminhada do turista entre o regime localizado ($1 \leq \mu < \mu_1$), representado pela área mais escura, na parte inferior do gráfico, e o regime estendido ($\mu_1 \leq \mu \leq N$), representado pela área mais clara, na parte superior do gráfico. Um detalhe interessante é que a largura da região de transição não se altera com o aumento de N .

Figura 16: Variação do índice de transmissão da caminhada do turista unidimensional sobre $M = 10000$ mapas com $N = 10$ (círculos), 100 (quadrados) e 1000 (triângulos) pontos. As linhas contínuas mostram os resultados analíticos obtidos pela Eq. 4.6.

4.7 Determinação da Memória Crítica de Transmissão

Podemos definir a memória crítica μ_1 como o valor de memória para o qual uma dada fração k das caminhadas são transmitidas, ou seja, $I_T(\mu_1) = k$. Na Eq. 4.6, podemos considerar que $N \gg \mu_1 + 1$. Esta consideração é justificável, uma vez que o gráfico da Fig. 17(b) mostra que a transição entre os regimes localizado e estendido se completa para valores relativamente pequenos de μ se comparados com N . Dessa forma, o índice de transmissão para $\mu = \mu_1$ pode ser escrito como:

$$I_T(\mu_1) = k = \left(1 - \frac{1}{2^{\mu_1}}\right)^N. \quad (4.8)$$

Atribuindo $k = 1/e$ e considerando $N \gg 1$, podemos escrever:

$$k = \frac{1}{e} = \left(1 - \frac{1}{N}\right)^N \Rightarrow 2^{\mu_1} = N \Rightarrow \mu_1 = \log_2 N. \quad (4.9)$$

A Tabela 3 fornece os valores obtidos para μ_1 por meio de interpolação linear dos dados numéricos e os calculados a partir da Eq. 4.9. A Fig. 18 mostra esses mesmos dados em forma de um gráfico. Pode-se notar claramente que o ajuste entre os valores obtidos por interpolação linear (quadrados) e os calculados pela Eq. 4.9 (linha contínua) melhora significativamente com o aumento de N .

Figura 17: (a) Variação do índice de transmissão da caminhada do turista unidimensional em função de N e de μ . (b) Visão superior, mostrando a transição entre os regimes localizado (região escura) e estendido (região clara) da caminhada unidimensional do turista. É interessante notar que a largura da região de transição é constante em função de N . A linha no alto à esquerda indica o limite de $\mu = N$. Os índices foram calculados sobre $M = 100000$ mapas com N variando de 10 a 10000 pontos e μ de 0 a 20.

Também podemos determinar μ_1 calculando o ponto de inflexão da equação 4.8:

$$\left. \frac{d^2 I_t(\mu)}{d\mu^2} \right|_{\mu=\mu_1} = 0. \quad (4.10)$$

Desenvolvendo a derivada para $\mu = \mu_1$, temos:

$$N \ln^2 2 [(N-1)(1-2^{-\mu_1})^{(N-2)} \cdot 4^{-\mu_1} - (1-2^{-\mu_1})^{(N-1)} \cdot 2^{-\mu_1}] = 0,$$

resolvendo a equação, podemos escrever:

$$\mu_1 = \log_2 N. \quad (4.11)$$

Em comparação com o modelo de percolação, podemos dizer que o valor de μ_1 equivale à probabilidade crítica p_c e que, desta forma, o índice de transmissão $I_T(\mu)$ é equivalente à probabilidade de percolação $\theta(p_c)$. É interessante notar que $\mu_1 \ll N$.

A figura 17(b) mostra que a largura região de transição é constante. Essa largura pode ser calculada a partir da reta tangente a $I_T(\mu)$ no ponto μ_1 , e determinando a diferença ε entre as abscissas referentes às ordenadas 0 e 1, como ilustrado na Fig. 19. Como a diferença entre as ordenadas é unitária a inclinação da reta tangente é $1/\varepsilon$, ou seja, $\varepsilon = 1/\tan \theta$, onde θ é o ângulo de inclinação da reta tangente em relação ao eixo das

N	μ_1	$\log_2 N$	N	μ_1	$\log_2 N$
10	2,966	3,322	200	7,638	7,644
20	4,139	4,322	300	8,221	8,229
30	4,781	4,907	400	8,610	8,644
40	5,220	5,322	500	8,969	8,966
50	5,587	5,644	600	9,258	9,229
60	5,830	5,907	700	9,413	9,451
70	6,090	6,129	800	9,628	9,644
80	6,297	6,322	900	9,803	9,813
90	6,424	6,492	1000	9,947	9,966
100	6,591	6,644			

Tabela 3: Valores de μ_1 estimados por interpolação linear e calculados a partir da Eq. 4.9.

abscissas. Mas $\tan \theta$ é numericamente igual ao valor da derivada de $I_T(\mu)$ no ponto μ_1 , dessa forma:

$$\varepsilon = \left(\frac{\partial I_T(\mu)}{\partial \mu} \Big|_{\mu=\mu_1} \right)^{-1}.$$

Sendo $I_T(\mu)$ dado pela Eq. 4.8 e $\mu_1 = \log_2 N$, podemos escrever:

$$\frac{\partial I_T(\mu)}{\partial \mu} = 2^{-\mu}(1 - 2^{-\mu})^{N-1} N \ln 2 \Rightarrow \frac{\partial I_T(\mu)}{\partial \mu} \Big|_{\mu=\mu_1} = \left(1 - \frac{1}{N}\right)^{N-1} \ln 2.$$

Dado que $N \gg 1$, $(1 - 1/N)^{N-1} = 1/e$, então:

$$\varepsilon = \frac{e}{\ln 2} \approx 3,92. \quad (4.12)$$

Uma vez que μ_1 depende de N , mas a largura da região de transição não, temos que a transição entre os regimes localizado e estendido da caminhada do turista unidimensional se torna cada vez mais nítida à medida que N aumenta. Neste ponto, é interessante definir a grandeza $\tilde{\mu} = \mu / \log_2 N$, de modo que a transição sempre ocorra em $\tilde{\mu}_1 = 1$, independentemente do tamanho do sistema. Nesta escala, a largura da região de transição é $\tilde{\varepsilon} = e / \ln N$, esta sim dependente do tamanho do sistema. Esta dependência, entretanto, é fraca, uma vez que é necessário aumentar muito N para modificar $\tilde{\varepsilon}$.

Figura 18: Valores de μ_1 em função de N obtidos por interpolação linear dos dados numéricos. A linha contínua representa a Eq. 4.9.

Figura 19: Esquema para a determinação da largura ε da região de transição no índice de transmissão da caminhada do turista unidimensional.

Podemos, então, afirmar que a caminhada determinista do turista em ambientes unidimensionais apresenta uma transição de percolação no intervalo de memória normalizada $\tilde{\mu}_1 = 1 \pm e/2 \ln N$, que pode ser notada no comportamento exploratório do turista. Para valores inferiores a $\tilde{\mu}_1$ ele se comporta como um explorador local, enquanto que para valores superiores a $\tilde{\mu}_1$, ele se torna um explorador global.

4.8 Conclusão

A dinâmica da caminhada determinista do turista, apresentada no Capítulo 3, é dependente da memória μ do caminhante. Foi mostrado que, nos casos do turista preguiçoso ($\mu = 0$) e do turista sem memória ($\mu = 1$), a exploração é bastante limitada. Os gráficos da Fig. 14 ilustram esse comportamento para ambientes unidimensionais:

- para $\mu = 0$, $I_R = 1$, indicando que todas as caminhadas refletem;
- para $\mu = 1$, $I_R = I_A = 1/2$, mostrando que metade das caminhadas refletem e metade são absorvidas.

Em ambos os casos, a exploração se limita a uma pequena porção do ambiente.

Por outro lado, foi também mostrado que quando $\mu \approx N$, a exploração se torna global, o que sugere a existência de um valor de memória que provoca a mudança do comportamento exploratório do turista.

Neste capítulo mostramos que a transição entre estes dois comportamentos se dá de forma abrupta numa região bastante estreita (independentemente do tamanho do sistema) de valores de memória. Essa região foi caracterizada por um valor de memória denominado de memória crítica. O valor dessa memória crítica é $\mu_1 = \log_2 N$, mostrando uma dependência direta com o tamanho do sistema e que ela é muito menor que N .

Além disso, mostramos também que a largura ε da região de transição é constante e igual a $e/\ln 2$, caracterizando uma transição aguda de percolação em um sistema unidimensional. Este resultado indica que um viajante, utilizando a dinâmica de movimentação da caminhada do turista, necessita apenas de uma memória $\mu_1 = \log_2 N$, onde N é o número de sítios de interesse, para poder explorar globalmente uma determinada região unidimensional.

5 *Difusão Anômala na Caminhada Determinista do Turista*

No Capítulo 2, mostramos como as caminhadas aleatórias podem ser utilizadas para modelar processos de difusão tradicional (com distribuição gaussiana). No Capítulo 4, mostramos que a caminhada unidimensional do turista apresenta uma transição de fase no regime de exploração do meio para $\mu_1 = \log_2 N$. Mostramos também que a região de transição tem uma largura constante $\varepsilon = e/\ln 2$.

Neste capítulo, apresentamos um estudo da evolução do estado estacionário da caminhada do turista unidimensional em função da memória. Este estado é caracterizado pelo aprisionamento do caminhante nos ciclos, uma vez que nesta condição o viajante não explora mais novas cidades. Mostramos que tanto na fase localizada quanto na estendida, a distribuição da posição segue uma gaussiana (difusão normal). À medida que $(\mu - \mu_1)$ se aproxima de zero, as gaussianas se transformam em q -gaussianas (superdifusão não-linear). Diminuindo ainda mais o valor de $(\mu - \mu_1)$, $q \approx 5/3$ e as q -gaussianas divergem, dando lugar às distribuições α -estáveis de Lévy (superdifusão não-linear fracionária). Mostramos então que a grandeza q funciona como parâmetro de ordem da transição.

5.1 Algoritmo Numérico

Para realizar a caminhada do turista a fim de verificar a distribuição da posição final do viajante no estado estacionário, considere o seguinte algoritmo:

1. inicializar a matriz $P(1 : \mu_f, 1 : M)$ com o valor 0;
2. repetir M vezes:
 - (a) gerar um mapa aleatório com N pontos no intervalo $[-1/2, 1/2]$;

- (b) determinar a tabela de vizinhos com $\mu = \mu_f$ e condições periódicas de contorno;
- (c) para cada valor de $\mu \in [1, \mu_f]$:
 - i. iniciar a caminhada no ponto mais próximo do centro ($x = 0$);
 - ii. repetir N_p vezes:
 - A. a cada passo verificar na tabela de vizinhos o primeiro ponto não visitado nos últimos μ passos;
 - B. avança um passo na caminhada;
 - iii. verificar a coordenada x do ponto final da caminhada;
 - iv. $P(\mu, M) \leftarrow x$.

A saída do programa fornece a matriz $P(1 : \mu_f, 1 : M)$ onde estão armazenadas as coordenadas das posições finais das μ_f caminhadas efetuadas nos M mapas após N_p passos.

Como o objetivo é estudar o comportamento exploratório no estado estacionário da caminhada, é necessário determinar um valor adequado de N_p para garantir que todas as caminhadas efetuadas tenham atingido esse estado. Para isso, foram efetuados estudos preliminares com poucos mapas pequenos ($M = 1000$ e $N = 100$) e $\mu_f = N/2$, para os valores de $N_p = 10N$, $5N$, $2N$ e N passos. Como os resultados obtidos nestes estudos não mostraram diferenças, concluiu-se que N passos seriam suficientes para garantir que as caminhadas atingiram o estado estacionário.

Uma vez fixado $N_p = N$, definiram-se os valores de $N = 10000$ pontos, $M = 100000$ mapas e $\mu_f = 50$, de forma que a simulação não ficasse demasiadamente lenta e nem comprometesse os recursos computacionais utilizados¹.

A partir da matriz P , definimos a grandeza:

$$P_{\mu}(x) = \frac{n(x)}{M\Delta x}, \quad (5.1)$$

onde $n(x)$ é o número de elementos de P no intervalo $[x, x + \Delta x[$ para uma dada memória μ . Dessa forma, a probabilidade de encontrar um viajante no intervalo $[x, x + \Delta x[$ para uma dada memória μ é:

$$P(x|\mu) = P_{\mu}(x)\Delta x. \quad (5.2)$$

Para uma melhor visualização dos resultados obtidos, o intervalo $[-1/2, 1/2]$ foi dividido em 100 subintervalos, de modo que $\Delta x = 1/100$. A Fig. 20 mostra $P_{\mu}(x)$ em função

¹O Capítulo 6 apresenta uma discussão a respeito das dificuldades encontradas para realizar simulações numéricas computacionais.

de x e de μ . Observando a Fig. 20, pode-se perceber que na região próxima a $\tilde{\mu}_1 = 1$ ocorre um espalhamento da função $P_{\tilde{\mu}}(x)$. A Fig. 21 mostra uma visão superior da região em torno de $x = 0$ da função $P_{\tilde{\mu}}(x)$, destacando suas curvas de nível. Nela é possível notar nitidamente a atenuação e o espalhamento das distribuições na região de transição.

Figura 20: Distribuição da posição final da caminhada unidimensional do turista em função da memória normalizada após $N_p = N$ passos. As distribuições estão normalizadas para cada valor de $\tilde{\mu}$. Os gráficos foram obtidos para $M = 100000$ mapas com $N = 10000$ pontos e $1 \leq \mu \leq 50$.

5.2 Ajuste dos Dados Numéricos ao Modelo de Difusão Anômala

Uma análise gráfica preliminar dos dados numéricos obtidos a partir do algoritmo apresentado na Seção 5.1, mostrou que as curvas $P_{\tilde{\mu}}(x)$ não eram gaussianas, pois apre-

Figura 21: Visão superior da Fig. 20 mostrando as curvas de nível na região central. Pode-se notar nitidamente a atenuação e o espalhamento das distribuições na região de transição. Os gráficos foram obtidos para $M = 100000$ mapas com $N = 10000$ pontos e $1 \leq \mu \leq 50$.

sentavam caudas longas, comparadas com o modelo de distribuição normal. Este comportamento é mais nítido na região de transição entre os regimes localizado e estendido da caminhada. Os gráficos das Figs. 22, 23, 24 e 25 mostram esse comportamento para μ entre 5 e 29.

O comportamento de cauda longa nos levou a concluir que as curvas deveriam ser q -gaussianas, com $q > 1$ e que, portanto, poderia se tratar de um modelo de difusão anômala (superdifusão) não-linear, como mostrado no Capítulo 2.

Figura 22: Distribuição da posição final do turista após N passos para $\mu = 5, 6, 7$ e 8 . As linhas contínuas indicam o ajuste efetuado por curvas q -gaussianas. As distribuições para $\mu \leq 4$ são gaussianas.

Figura 23: Distribuição da posição final do turista após N passos para $\mu = 9, 10, 11, 12$ e 13 . As linhas contínuas indicam o ajuste efetuado por curvas q -gaussianas.

Figura 24: Distribuição da posição final do turista após N passos para $\mu = 14, 16, 18, 20$ e 22 . As linhas contínuas indicam o ajuste efetuado por curvas q -gaussianas.

Figura 25: Distribuição da posição final do turista após N passos para $\mu = 23, 25, 27$ e 29 . As linhas contínuas indicam o ajuste efetuado por curvas q -gaussianas. As distribuições para $\mu \geq 30$ são gaussianas.

Considerando os dados numéricos obtidos como uma amostra conhecida para a qual se deseja ajustar um modelo teórico, calculamos a variância dos dados para cada valor de μ e utilizamos o método de máxima verossimilhança² para estimar os valores de q e seus respectivos erros. As curvas para $1 \leq \mu \leq 4$ e para $\mu \geq 30$ mostraram-se gaussianas ($q = 1$). A Tabela 4 mostra os valores obtidos para $5 \leq \mu \leq 30$.

É interessante notar que na região de μ próxima a μ_1 , o valor estimado de q está muito próximo de $5/3$. Como visto no Capítulo 2, para este valor as curvas q -gaussianas não têm variância finita. De fato, observando os valores de σ^2 na Tabela 4, observamos um rápido crescimento nessa região. Os gráficos das Figs. 26 e 27 ilustram esse comportamento. Observa-se claramente que para μ próximo de μ_1 a variância diverge rapidamente e que, nesta região, o valor de q é máximo, ou seja, o valor de q está servindo como parâmetro de ordem da transição observada.

μ	q	Δq	$\sigma^2 (\times 10^{-4})$	μ	q	Δq	$\sigma^2 (\times 10^{-4})$
5	1,0449	0	0,489	18	1,7000	0,3000	32,57
6	1,2414	0	1,032	19	1,7000	0,1000	15,61
7	1,6315	0,0001	3,264	20	1,6500	0,0400	8,171
8	1,4000	0,0020	12,56	21	1,6400	0,0100	4,267
9	1,4980	0,0020	50,93	22	1,6030	0,0020	2,232
10	1,5100	0,0800	189,5	23	1,5048	0,0003	1,042
11	1,5000	0,3000	470,3	24	1,4251	0,0001	0,796
12	1,6664	-	637,2	25	1,1640	0	0,512
13	1,6666	-	565,5	26	1,0894	0	0,449
14	1,6666	-	376,6	27	1,0144	0	0,348
15	1,6666	-	219,1	28	1,0142	0	0,346
16	1,6666	-	116,6	29	1,0141	0	0,348
17	1,7000	0,6000	61,28	30	1,0000	0	0,345

Tabela 4: Valores de $q \pm \Delta q$ estimados pelo método de máxima verossimilhança e de σ^2 estimados a partir dos dados numéricos para os valores de μ entre 5 e 30. O valor 0 na coluna Δq indica que o erro é menor que 10^{-4} . Os (-) indicam um erro maior que o valor determinado para q , devido ao grande espalhamento dos dados.

A partir dos valores estimados para q e para σ^2 foram realizados os ajustes dos dados numéricos por curvas q -gaussianas. As linhas contínuas nos gráficos das Figs. 22, 23, 24 e 25 mostram os ajustes obtidos. Nestes gráficos, chama a atenção o fato de que na região anterior à transição, as curvas se ajustam muito bem aos dados numéricos, mas o mesmo não se observa nem na região de transição nem na região posterior a ela. Entretanto, para $q = 27$ já se nota novamente um ajuste razoável aos dados numéricos e para $\mu \geq 30$, as distribuições voltam a ser gaussianas.

²Este método é descrito em detalhes no Apêndice C.

Figura 26: Valores do parâmetro de ajuste q em função da memória μ para as curvas de $P_{\tilde{\mu}}(x)$.

Como estas curvas foram ajustadas considerando um modelo de difusão anômala não-linear, acreditamos que, na região de transição, deva ser considerado um modelo de difusão anômala com derivadas parciais de ordem fracionária, que leva a soluções do tipo das distribuições estáveis de Lévy, tratadas no Capítulo 2.

De qualquer forma, este resultado mostra que o modelo da caminhada unidimensional do turista apresenta uma complexidade maior do que a imaginada inicialmente. No estado estacionário, podemos distinguir cinco regiões de comportamentos distintos:

- inicialmente, temos uma região de difusão normal (com distribuições gaussianas);
- em seguida, temos uma região de superdifusão não-linear (com distribuições q -gaussianas);
- na região de transição, temos uma superdifusão, caracterizada por grande espalhamento, possivelmente com variância infinita, cuja caracterização completa depende de investigação mais aprofundada;
- em seguida, nota-se uma região estreita, onde temos novamente superdifusão não-linear e

Figura 27: Variância σ^2 das curvas de $P_{\tilde{\mu}}(x)$ em função da memória μ . É interessante notar a divergência na variância em torno da memória crítica. Esta região coincide com o valor máximo de q no gráfico da Fig. 26. Nas Figs. 20 e 21, esta região equivale à menor amplitude e máximo espalhamento da função $P_{\tilde{\mu}}(x)$.

- finalmente, tem-se outra região de difusão normal, para valores de $\mu \gg 1$.

Outro fato digno de nota é que em todos os casos observados, o ponto de máximo está na origem. Para valores pequenos de memória, isto se deve à pequena excursão do turista. Uma vez que ele parte sempre do ponto mais próximo da origem e para μ pequeno o comprimento da parte transiente é curto, é de se esperar que a posição final esteja em torno da origem. Para valores maiores de μ , esse comportamento se deve ao aparecimento de ciclos com períodos longos que contêm a origem, sendo que para $\mu \geq \mu_1$, o turista percorre todo o sistema. Como as simulações foram efetuadas com condições periódicas de contorno, as extremidades do intervalo $[-1/2, 1/2]$ estão conectadas e, com isso, o turista volta a passar pela origem várias vezes.

5.3 Conclusão

Como visto no Capítulo 4 mostramos que a caminhada do turista unidimensional apresenta uma transição de fase no comportamento exploratório do turista para um valor

de memória $\mu_1 = \log_2 N$. Para que isso ocorra, é necessário que a dinâmica de exploração permita que a região explorada aumente rapidamente para μ próximo de μ_1 . Este comportamento sugere que na região de transição a posição do turista, no estado estacionário da caminhada, siga um modelo de difusão anômala.

Neste capítulo mostramos que o estado estacionário da caminhada apresenta comportamentos distintos para os diferentes valores da memória:

- nas regiões distantes da transição, tem-se um modelo de difusão tradicional, caracterizado por distribuições gaussianas;
- nas regiões próximas da transição, tem-se um modelo de superdifusão não-linear, caracterizado por distribuições q -gaussianas;
- na região de transição, tem-se um modelo de superdifusão, caracterizada por uma variância infinita.

Este último caso está possivelmente relacionado com a equação de difusão com derivadas parciais de ordem fracionária, cuja solução são as funções α -estáveis de Lévy e serão objeto de estudo posterior.

Mostramos também que o parâmetro q serve como parâmetro de ordem da transição observada.

6 *Considerações Finais*

Os trabalhos em simulação numérica muitas vezes esbarram em dificuldades que poucas vezes são relatadas em detalhes em suas documentações. Por esse motivo, tem-se às vezes a impressão de que basta criar um código executável e deixar o computador fazer o resto, voltando algum tempo depois para analisar os dados gerados pelo programa.

O objetivo deste capítulo é dar um panorama geral das dificuldades encontradas durante o desenvolvimento deste trabalho.

6.1 Escolha do Software

Uma questão essencial em simulações numéricas consiste na escolha adequada de uma linguagem de programação para desenvolver os códigos. A grande quantidade de linguagens comercialmente disponíveis torna esta escolha ainda mais difícil. Cada linguagem apresenta uma série de características desejáveis e outras tantas indesejáveis para cada problema em particular. As linguagens de mais baixo nível, como o Assembly, podem ser extremamente rápidas, porém, em quase todos os casos é extremamente difícil utilizá-las para quem não tem uma longa experiência em manipulação binária. Por outro lado, as linguagens de alto nível utilizadas por pacotes comerciais de manipulação simbólica (como MatLab ou Mathematica), embora simples de utilizar, são, na maioria das vezes, extremamente lentas por serem linguagens interpretadas e não compiláveis.

Dessa forma, a escolha recai, quase sempre, em linguagens de programação comerciais, nem sempre desenvolvidas para essa finalidade específica. No caso deste trabalho, optamos por realizar as simulações em C++ ANSI, por se tratar de uma linguagem cuja sintaxe é relativamente simples e que dispõe de uma biblioteca de funções matemáticas bastante ampla. Outro fator que determinou a escolha desta linguagem foi a possibilidade de trabalhar com alocamento dinâmico de memória, permitindo assim maior economia de um recurso extremamente limitado.

Os programas visuais, como o desenvolvido para a visualização das caminhadas, foram escritos em Visual Basic 6, da Microsoft, por se tratar de uma linguagem bastante simples e que permite uma manipulação fácil e rápida dos elementos visuais, como botões, caixas de texto, listas, e janelas de figuras.

Além dessas linguagens, também foram utilizados o seguintes produtos:

- Visual Studio 6, da Microsoft, para edição e compilação dos códigos executáveis em C++ e Visual Basic,
- Mathematica 5, da Wolfram Research, para manipulação simbólica,
- Origin 7.5, da OriginLab, para manipulação de tabelas, análise estatística dos dados e criação de gráficos,
- T_EXnic Center, software livre, para edição de textos em L^AT_EX, e
- MiK_TE_X, software livre, para compilação de documentos em L^AT_EX.

6.2 Configuração do Equipamento

Da mesma forma que a questão do software a utilizar, a escolha do equipamento (hardware) é essencial para um bom desempenho das simulações numéricas. Entretanto, na maioria das vezes, é mais difícil conseguir um bom equipamento do que um pacote de programas adequado. Este trabalho foi realizado em dois computadores pessoais (PC), ambos com configurações idênticas:

- processador Intel Pentium IV 2,4 GHz,
- memória RAM de 1,0 GBytes,
- disco rígido de 40 GBytes e
- sistema operacional Microsoft Windows XP Professional.

Um dos computadores foi utilizado exclusivamente para executar as simulações, enquanto que o outro foi utilizado para a análise dos dados, bem como para redigir esta Dissertação.

6.3 Os Códigos das Simulações Numéricas

Uma vez definida a linguagem de programação a ser utilizada e sabendo-se exatamente que fenômeno se deseja simular, escrever o código da simulação é uma tarefa relativamente simples e rápida. Entretanto, nem sempre o primeiro código escrito é o melhor, e, assim, segue-se um processo relativamente lento de adaptação do código às características do problema e do equipamento utilizado.

Como este trabalho se refere a caminhadas em meios desordenados, nossa primeira idéia foi gerar uma grande quantidade de mapas para cada tamanho de sistema a ser estudado, para depois fazer todas as simulações necessárias sobre o mesmo conjunto de mapas. Este procedimento consumiria algum tempo para gerar os mapas, mas depois seria muito mais rápido para simular as caminhadas.

Seria então necessário gerar $M \times N$ mapas, onde M é o número de mapas gerados para cada valor de N pontos por mapa. Em seguida, para cada mapa, seria necessário calcular as distâncias entre todos os pares de pontos e gerar as tabelas de vizinhança. As topologias dos mapas e suas tabelas de vizinhança então seriam gravadas em arquivos de texto com codificação ASCII¹. Considerando que:

- a posição de um ponto em um mapa unidimensional é indicada por um número de ponto flutuante com precisão simples (5 casas decimais pelo menos para mapas com 10000 pontos),
- cada caracter (aqui incluídos tanto os caracteres numéricos quanto a vírgula decimal) ocupa 8 bits em um arquivo texto e
- cada tabela de vizinhança tem $N \times N$ entradas, onde N é o número de pontos do mapa,

é fácil perceber que os arquivos gerados para mapas com 10000 pontos ocupam muito espaço de armazenamento. Quando M é da ordem de 10^5 , todo o espaço disponível do disco rígido do computador fica comprometido somente com os mapas.

A primeira tentativa de simulação esbarrou nessa dificuldade. Foram escritos um código para gerar os mapas e outro para calcular suas tabelas de vizinhanças. Em poucas

¹O padrão ASCII (American Standard Code for Information Interchange) codifica cada caracter alfa-numérico ou de controle em uma seqüência de 7 bits. Entretanto, o padrão mais utilizado atualmente é o ASCII estendido, que utiliza 8 bits para cada caracter.

horas de trabalho, o programa para calcular as tabelas de vizinhança parou por falta de espaço em disco.

A solução foi comprometer a velocidade das simulações em favor do espaço de armazenamento. Dessa forma, foram escritos códigos que geravam seus mapas e os descartavam uma vez efetuada a simulação neles.

6.4 Gerenciamento de Memória e Tempo de Execução

Uma vez resolvido o problema do armazenamento em disco, esbarramos em outra dificuldade prática: a memória volátil disponível. A maioria dos computadores pessoais à venda atualmente apresenta 128 ou 256 MBytes de memória RAM. A Microsoft, fabricante do sistema operacional Windows XP, recomenda que a configuração mínima para utilizar adequadamente este sistema operacional seja de 128 MBytes de memória RAM. Assim, os computadores de menor configuração ficam extremamente lentos quando se tenta executar neles quaisquer aplicativos, devido à necessidade de fazer *swap* constantemente².

Em um computador com 1,0 GByte de memória RAM, como o utilizado, o processador efetua menos *swap*, entretanto, a memória continua sendo um limitador para muitos processos. Consideremos um mapa de N pontos. Para gerar a tabela de vizinhança, é necessário calcular e armazenar $N(N - 1)$ distâncias, sendo que cada uma delas ocupa 4 bytes. Em seguida é necessário ordenar as $N - 1$ distâncias de um determinado ponto para determinar a ordem da vizinhança. Para este processo é necessário pelo menos mais $2N$ posições de memória. Uma vez calculada a tabela, ela é armazenada em $N(N - 1)$ posições de memória. Isso tudo sem considerar a memória necessária para efetuar os cálculos e para armazenar outras variáveis, como os índices das tabelas, ou o próprio código executável.

A solução para este problema veio da linguagem escolhida. O C++ permite um gerenciamento relativamente simples da memória, sendo possível alocar dinamicamente posições de memória. Dessa forma, as posições de memória que não forem mais necessárias, como a matriz de distâncias ou as posições utilizadas para ordenar as distâncias, podem ser desalocadas, liberando memória para os demais processos. Outra solução está na forma de calcular a matriz de distâncias. Ao invés de calcular todas as distâncias e armazená-las, calculam-se apenas as distâncias a um único ponto de cada vez e, a partir delas,

²O processo de *swap* consiste em salvar e recuperar parte da memória RAM em disco, de modo a liberar espaço de memória para que o processador possa trabalhar.

determina-se a ordem dos vizinhos desse ponto. Dessa forma, utilizam-se apenas $N - 1$ posições de memória para o cálculo das distâncias.

Outro problema enfrentado foi determinar o ponto de parada das simulações. Nas simulações do processo de percolação, era necessário determinar qual a memória suficiente para que se notasse a percolação. Para isso, as primeiras simulações utilizaram todos os valores de memória possíveis ($1 \leq \mu \leq N - 2$). Uma vez analisados os resultados dessas simulações preliminares, notou-se que $\mu_1 \ll N$, o que permitiu limitar a faixa de variação de μ , reduzindo o tempo de simulação. Já nas simulações dos processos difusivos, era necessário determinar o número de passos necessários para garantir que o processo havia encontrado um estado estacionário. Foram realizadas simulações preliminares com $10N, 5N, 2N$ e N passos. Observou-se que em todos os casos os resultados foram os mesmos, indicando que N passos eram suficientes para garantir o estado estacionário da difusão.

6.5 Conclusão

As dificuldades encontradas em trabalhos de simulação numérica nem sempre são devidamente documentados, deixando a falsa impressão de que se tratam de trabalhos que não requerem muito esforço, uma vez que o computador “faz tudo sozinho”.

Neste capítulo procuramos dar um panorama geral das dificuldades encontradas durante a realização deste trabalho, tanto para fins de documentação como para ajudar quem estiver iniciando nesta área, a fim de que possa evitar alguns dos problemas que tivemos. Com essa finalidade, mostramos não somente os problemas em si, mas também a forma encontrada para solucioná-los.

7 Conclusões

A caminhada determinista do turista pode ser entendida como uma dinâmica de exploração de um meio desordenado. O sucesso na exploração do ambiente depende da memória do viajante. Para valores pequenos de memória, a exploração é altamente localizada, e o viajante não consegue percorrer todo o sistema. Já para valores de memória da ordem de N , a exploração passa para um regime estendido, onde o viajante consegue percorrer todo o sistema. Nosso trabalho teve como foco determinar o valor da memória crítica na qual ocorre a transição entre esses dois regimes exploratórios. Além disso, procuramos entender a forma como ela altera o estado estacionário da caminhada. O estado estacionário da caminhada do turista se caracteriza pelo aprisionamento do viajante nos ciclos. Foram considerados somente os ambientes unidimensionais neste estudo.

No Capítulo 2, foram apresentados os fenômenos de transporte e as caminhadas aleatórias. Mostrou-se como estas últimas podem ser utilizadas para modelar processos difusivos. A principal característica destes processos é a dependência linear da variância da posição com o tempo, caracterizando um comportamento gaussiano. Os processos de difusão anômala também foram apresentados neste capítulo. Nestes processos a variância cresce em função do tempo por uma lei de potência. O expoente da lei de potência determina se o processo é subdifusivo, normal ou superdifusivo. Duas formas de modelar a difusão anômala foram apresentadas:

- i) a equação de difusão não-linear, cuja solução são as funções q -gaussianas e
- ii) a equação de difusão de Lévy-Gnedenko, cuja solução são as funções α -estáveis de Lévy.

No Capítulo 3 apresentamos uma revisão sobre os métodos de estudo e os resultados para a caminhada determinista do turista. Caracterizamos o meio em que a caminhada ocorre através de sua estatística de vizinhanças. Também mostramos uma forma original de estimar os efeitos de borda e apresentamos um programa computacional desenvolvido

para visualizar as caminhadas em ambientes de uma, duas e três dimensões. Em seguida, os aspectos dinâmicos da caminhada foram discutidos, como a tabela de vizinhança e o grafo do turista. Algumas situações interessantes que ocorrem quando alteramos os parâmetros da caminhada também foram discutidas e as estatísticas associadas a cada caso foram discutidas. No final os modelos de campo médio (*random link* e *random map*), que representam o limite do modelo para altas dimensionalidades, foram apresentados.

No Capítulo 4 apresentamos uma breve descrição do processo de percolação. Em seguida, mostramos, numérica e analiticamente, que a transição entre os regimes localizado e estendido de exploração da caminhada do turista unidimensional se dá de forma abrupta numa região bastante estreita (independentemente do tamanho do sistema) de valores de memória. Essa região foi caracterizada por um valor de memória crítica $\mu_1 = \log_2 N$, onde N é o número de sítios de interesse, mostrando uma dependência direta com o tamanho do sistema e que ela é muito menor que N . Além disso, mostramos também que a largura da região de transição é constante e igual a $e/\ln 2$, caracterizando uma transição em um sistema unidimensional. Este resultado indica que um viajante, utilizando a dinâmica de movimentação da caminhada do turista, necessita apenas de uma memória $\mu_1 = \log_2 N$, para poder explorar globalmente uma determinada região unidimensional.

No Capítulo 5 apresentamos um estudo numérico do estado estacionário da caminhada do turista em função da memória. Mostramos que ele apresenta comportamentos distintos para os diferentes valores da memória:

- nas regiões distantes da transição, tem-se um modelo de difusão tradicional, caracterizado por distribuições gaussianas;
- nas regiões próximas da transição, tem-se um modelo de superdifusão não-linear, caracterizado por distribuições q -gaussianas;
- na região de transição, tem-se um modelo de superdifusão, caracterizada por uma variância infinita.

Este último caso está possivelmente relacionado com a equação de difusão com derivadas parciais de ordem fracionária apresentado no Capítulo 2, cuja solução é representada pelas funções α -estáveis de Lévy. Mostramos também que o parâmetro q serve como parâmetro de ordem da transição observada.

Finalmente, no Capítulo 6 apresentamos um panorama geral das dificuldades encontradas durante a realização deste trabalho, bem como a forma encontrada para solucioná-

las.

Em virtude do estudo realizado, temos como objetivos futuros de trabalho:

- caracterizar as distribuições do estado estacionário na região de transição para ambientes unidimensionais;
- estender o estudo realizado para ambientes com mais dimensões;
- determinar a existência ou não de um coeficiente de difusão para o modelo estudado e verificar sua dependência com a dimensionalidade;
- adaptar os algoritmos desenvolvidos para serem executados em sistemas computação distribuída (multiprocessamento);
- estender o estudo realizado para a caminhada estocástica do turista; neste caso, a temperatura tem um papel importante na forma como o meio é explorado;
- determinar a existência de uma temperatura que permita máxima exploração com menor distância percorrida e estimar seu valor em função da dimensionalidade e da memória;
- uma vez que essa temperatura exista, ela pode ser utilizada para desenvolver um método de otimização estocástico (ou misto, em conjunto com a memória crítica μ_d), que poderá ser comparado com os métodos tradicionais, como o recozimento simulado e o algoritmo genético.

APÊNDICE A – Funções Especiais

Neste Apêndice são definidas algumas funções especiais usadas ao longo do texto desta dissertação.

A.1 Transformada de Fourier

Seja $f(x)$ uma função contínua em $\mathbb{R}$, tal que $\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)| < \infty$. A transformação linear $\mathcal{F}\{f(x)\}$ dada por:

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} f(x) \quad (\text{A.1})$$

é conhecida como *transformada de Fourier* da função $f(x)$.

A transformada de Fourier fornece uma forma de representar a função $f(x)$ por meio de seu espectro de frequências. Podemos também definir a *transformada inversa de Fourier* como a transformada que recupera a função $f(x)$ a partir de seu espectro de frequências:

$$\mathcal{F}^{-1}\{F(k)\} = f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} F(k). \quad (\text{A.2})$$

As transformadas de Fourier têm uma vasta gama de aplicações nas mais diversas áreas: ultra-som, ressonância magnética, tomografia, telecomunicações, análises de sinais, tratamento de imagens, entre outras¹.

¹Por vezes, se torna interessante definir a transformada de Fourier sem o fator $1/\sqrt{2\pi}$ e a transformada inversa por:

$$\mathcal{F}^{-1}\{F(k)\} = f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} F(k). \quad (\text{A.3})$$

Neste caso, a transformada de Fourier tem a mesma definição da função característica, definida no Apêndice B.

A.2 Função Delta de Dirac

A função delta de Dirac, em uma dimensão, é definida por [49]:

$$\delta(x) = 0 \text{ para } x \neq 0 \quad (\text{A.4})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) = 1. \quad (\text{A.5})$$

A.2.1 Aplicação da Função Delta ao Cálculo de Integrais Definidas

De acordo com o teorema do valor médio do cálculo, se $f(x)$ e $g(x)$ são funções contínuas em $[a, b]$ e $g(x) \geq 0$, $\forall x \in [a, b]$, então existe $c \in]a, b[$, tal que:

$$\int_a^b dx g(x) f(x) = f(c) \int_a^b dx g(x).$$

Dessa forma, fazendo $g(x) = \delta(x)$, $f(x)g(x) = 0$ para todo $x \neq 0$ e

$$\int_D dx \delta(x) f(x) = f(0), \quad (\text{A.6})$$

ou, substituindo o argumento da função delta por $x - x_0$:

$$\int_D dx \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0). \quad (\text{A.7})$$

O domínio de integração D pode sempre ser escolhido de modo a conter o ponto no qual o argumento da função delta se anula. Este resultado pode ser generalizado para três dimensões, fazendo:

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) dv = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) dx dy dz. \quad (\text{A.8})$$

A.2.2 Função Delta como Transformada de Fourier

Consideremos a função $\tilde{\rho}(k)$ definida pela transformada de Fourier da função $\rho(x)$:

$$\tilde{\rho}(k) = \mathcal{F}\{f(x)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} \rho(x).$$

Se $\rho(x) = \delta(x - x_0)$, utilizando a Eq. A.7:

$$\tilde{\rho}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} \delta(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx_0},$$

mas, $\rho(x) = \mathcal{F}^{-1}\{\tilde{\rho}(k)\}$, então:

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} \tilde{\rho}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik(x-x_0)}.$$

Como $\rho(x) = \delta(x - x_0)$, podemos definir a função delta de Dirac como:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik(x-x_0)}. \quad (\text{A.9})$$

A.2.3 Função Delta como Limite de uma Gaussiana

Consideremos a distribuição gaussiana, com média nula e variância ϵ^2 :

$$N_x(0, \epsilon^2) = \frac{1}{\epsilon\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\epsilon^2}}.$$

Uma vez que a área é conservada, devido ao fator de normalização $1/\epsilon\sqrt{2\pi}$, a integral definida da função no intervalo $]-\infty, +\infty[$ é 1. Esta função tem um pico bem definido em $x = 0$, cuja altura aumenta à medida que ϵ diminui. Dessa forma, quando $\epsilon \rightarrow 0$, a função gaussiana terá um pico de altura indefinida em $x = 0$ e será nula para os demais valores de x , porém mantendo a integral definida com valor unitário. Estas características são as mesmas da função delta de Dirac, de modo que podemos definir:

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\epsilon^2}}. \quad (\text{A.10})$$

A.2.4 Função Delta como Limite de uma Distribuição de Cauchy (Laurentziana)

Consideremos a laurentziana, com parâmetro de escala a e média nula:

$$C_a(x) = \frac{a}{\pi(a^2 + x^2)}. \quad (\text{A.11})$$

Observe que a condição de normalização $\int_{-\infty}^{\infty} dx C_a(x) = 1$ é satisfeita. Assim como a gaussiana, esta tem um pico bem definido em $x = 0$, que aumenta à medida que a diminui. Assim, quando $a \rightarrow 0$, a distribuição de Cauchy terá um pico de altura indefinida em $x = 0$ e será nula para os demais valores de x , porém mantendo a integral definida com valor unitário. Como estas características são as mesmas da função delta de Dirac, podemos definir:

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{a}{\pi(a^2 + x^2)}. \quad (\text{A.12})$$

A.3 Função Gama

A função gama é definida por [50]:

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dt t^{z-1} e^{-t}, \quad (\text{A.13})$$

onde z pertence ao conjunto dos números complexos ($\mathbb{C}$).

Utilizando integração por partes, é possível mostrar que:

$$\Gamma(z+1) = z \Gamma(z), \quad (\text{A.14})$$

e, como $\Gamma(1)$ é:

$$\Gamma(1) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} = -e^{-t} \Big|_0^{\infty} = 1,$$

a função gama se torna uma generalização do fatorial:

$$\Gamma(z) = (z-1)!. \quad (\text{A.15})$$

A.4 Função Beta

A função beta é definida por [50]:

$$B(a, b) = \int_0^1 dt t^{a-1} (1-t)^{b-1} = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}, \quad (\text{A.16})$$

com $\text{Re}(a) > 0$ e $\text{Re}(b) > 0$. A função beta é simétrica, ou seja, $B(a, b) = B(b, a)$.

Considerando que a função gama é uma generalização do fatorial, a função beta pode ser associada ao inverso do número binomial de Newton:

$$\begin{aligned} \binom{a}{b} &= \frac{a!}{b!(a-b)!} = \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(b+1)\Gamma(a-b+1)} = \frac{(a+1)\Gamma(a+1)}{(a+1)\Gamma(b+1)\Gamma(a-b+1)} \\ &= \frac{1}{(a+1)} \frac{\Gamma(a+2)}{\Gamma(b+1)\Gamma(a-b+1)} = \frac{1}{(a+1)B(a-b+1, b+1)}. \end{aligned}$$

A função beta incompleta é definida por [50]:

$$I_x(a, b) = \frac{1}{B(a, b)} \int_0^x dt t^{a-1} (1-t)^{b-1}, \quad (\text{A.17})$$

com $\text{Re}(a) > 0$, $\text{Re}(b) > 0$ e $x \in [0, 1]$.

A.5 Função Exponencial Generalizada

A função exponencial generalizada, ou função q -exponencial, cuja definição está associada à termoestatística não-extensiva de Tsallis [51], é dada por [17, 25]:

$$e_q(x) = [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)}. \quad (\text{A.18})$$

A denominação *exponencial generalizada* se deve ao fato de que:

$$\lim_{q \rightarrow 1} e_q(x) = e_1(x) = e^x. \quad (\text{A.19})$$

APÊNDICE B – Resumo: Teoria de Distribuições de Probabilidades

Conceitos básicos da teoria de distribuições de probabilidades utilizados ao longo desta Dissertação são revistos resumidamente neste Apêndice.

B.1 Variáveis Aleatórias

Denominam-se *experimentos aleatórios* aqueles cujos resultados não podem ser previstos quando são realizados várias vezes e em condições idênticas. O conjunto de todos os resultados possíveis de um experimento aleatório é chamado de *espaço amostral* desse experimento. Um *evento* é qualquer subconjunto de um espaço amostral.

Uma *variável aleatória* é uma variável cujos valores são determinados pelos resultados de experimentos aleatórios (eventos) e a elas podemos associar modelos probabilísticos. Se a variável aleatória assume valores num subconjunto enumerável de pontos do conjunto real, ela é dita *variável aleatória discreta*, caso contrário, ela é dita *variável aleatória contínua*. Neste trabalho, utilizamos a notação usual da teoria das probabilidades, indicando os valores que a variável aleatória pode assumir por letras minúsculas.

B.1.1 Variáveis Aleatórias Discretas

Considere uma variável aleatória discreta X , que pode assumir os valores $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$. A *função de probabilidade* $f(x_i)$, que associa a cada valor x_i sua probabilidade de ocorrência $f(x_i) = p_i = \text{Prob}(X = x_i)$, tem a seguinte propriedade:

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1. \quad (\text{B.1})$$

Esta é a condição de normalização da função de probabilidade (também chamada de *momento de ordem zero* da distribuição), indicando que o espaço amostral contém todos os eventos, ou que todo o domínio da variável aleatória foi considerado.

Para esta mesma variável aleatória discreta, chamamos *valor médio*, ou *esperança matemática* de X , ou ainda *valor esperado de X* ao valor:

$$E(X) = \langle x \rangle = \sum_{i=1}^n p_i x_i, \quad (\text{B.2})$$

este valor é o “centro de massa” da função de probabilidade $f(x)$, também chamado de *primeiro momento* da distribuição.

Chamamos *variância* de X ao valor:

$$\text{Var}(X) = E[(X - E(X))^2] = \sum_{i=1}^n p_i [x_i - E(X)]^2 = E(X^2) - E^2(X). \quad (\text{B.3})$$

A raiz quadrada da variância indica a dispersão de $f(x)$ em torno de seu valor médio. Nota-se que a variância está relacionada com o segundo momento de X ($E(X^2)$). Como veremos adiante, momentos de ordens superiores podem ser considerados.

B.1.2 Variáveis Aleatórias Contínuas

Sejam X uma variável aleatória contínua, que pode assumir qualquer valor real $x \in [-\infty, \infty]$,¹ e $f(x) \geq 0 \forall x$ uma função de tal forma que a probabilidade de X assumir valores entre x_0 e x_1 é:

$$\text{Prob}(x_0 \leq X \leq x_1) = \int_{x_0}^{x_1} dx f(x). \quad (\text{B.4})$$

A função $f(x)$ assim definida é chamada *função densidade de probabilidade* de X . Particularmente, se $x_0 = -\infty$ e $x_1 = \infty$, a Eq. B.4 determina a probabilidade da variável aleatória X assumir quaisquer valores reais. Ora, esta probabilidade é igual a 1, logo,

$$\text{Prob}(-\infty < X < \infty) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) = 1,$$

que é a condição de normalização da função densidade de probabilidade.

Através de uma generalização da Eq. B.2, pode-se calcular o valor esperado (μ) para

¹Em princípio, uma variável aleatória X pode assumir quaisquer valores dentro de qualquer domínio contínuo $D = [a, b] \subset \mathbb{R}$.

a variável aleatória contínua X :

$$\mu = E(X) = \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) x. \quad (\text{B.5})$$

Da mesma forma, a variância (σ^2) pode ser calculada por generalização da equação B.3:

$$\sigma^2 = E[(X - E(X))^2] = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) (x - \mu)^2 = E(X^2) - E^2(X). \quad (\text{B.6})$$

De um modo geral, se $g(x)$ for uma função contínua de x , o valor esperado de $g(x)$ ($\langle g(x) \rangle$), dada a função densidade de probabilidade $f(x)$, é dada por:

$$E[g(x)] = \langle g(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) g(x). \quad (\text{B.7})$$

Também é possível reobter o caso discreto a partir do caso contínuo, simplesmente fazendo

$$f(x) = \sum_i p_i \delta(x - x_i), \quad (\text{B.8})$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac, definida no Apêndice A.

B.2 Momentos de uma Distribuição

Seja X uma variável aleatória contínua e $f(x)$ a função densidade de probabilidade dessa variável. Quando $f(x)$ apresenta uma forte tendência central, isto é, um valor máximo muito bem definido em um valor particular x_m (moda), é, muitas vezes, preferível caracterizá-la por valores numéricos relacionados com seus *momentos*, que são os valores esperados para as potências inteira de x [31], ou seja, o n -ésimo momento de $f(x)$ é:

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) x^n. \quad (\text{B.9})$$

Se todos os seus momentos forem conhecidos, é possível reobter a função $f(x)$.

B.3 Função Característica

Denomina-se função característica da distribuição $f(x)$ a função $\tilde{f}(k)$ que representa o valor esperado para e^{ikx} , isto é:

$$\tilde{f}(k) = \langle e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{ikx}. \quad (\text{B.10})$$

Ora, este valor equivale à transformada de Fourier da função $f(x)$ multiplicada pelo fator $\sqrt{2\pi}$, ou seja²:

$$\tilde{f}(k) = \sqrt{2\pi} \mathcal{F}\{f(x)\}. \quad (\text{B.11})$$

Reciprocamente, para obtermos a função de distribuição $f(x)$, devemos aplicar a transformada de Fourier inversa da função característica $\tilde{f}(k)$:

$$f(x) = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tilde{f}(k) \right\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} \tilde{f}(k). \quad (\text{B.12})$$

B.4 Distribuição Conjunta de Variáveis Aleatórias Multidimensionais

Na maioria das vezes, ao descrever os resultados de um experimento estatístico, atribuem-se a um mesmo ponto amostral os valores de duas ou mais variáveis aleatórias. Assim, se tivermos n variáveis aleatórias discretas $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$ e uma função f que, para cada n -upla $\vec{X} = (X_1, X_2, X_3, \dots, X_n)$ associa um valor $f(\vec{x}) = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ tal que $f(\vec{x}) = \text{Prob}(X_1 = x_1, X_2 = x_2, X_3 = x_3, \dots, X_n = x_n)$ indica a probabilidade de ocorrerem simultaneamente os eventos $X_1 = x_1, X_2 = x_2, X_3 = x_3, \dots, X_n = x_n$, então essa função f recebe o nome de *função de distribuição conjunta* das variáveis aleatórias $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$.³

B.5 Distribuição Marginal e Condicional

Consideremos duas variáveis aleatórias contínuas X e Y com função de distribuição conjunta $f(x, y)$. Denominam-se *distribuições marginais* de X e de Y as funções:

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(x, y), \quad (\text{B.13})$$

$$h(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x, y). \quad (\text{B.14})$$

Se as variáveis X e Y forem independentes, podemos escrever a função distribuição conjunta na forma de produto das funções marginais: $f(x, y) = g(x)h(y)$.

Define-se a *probabilidade condicional* de $x \leq X \leq x + dx$ dado que $y \leq Y \leq y + dy$

²A transformada de Fourier é definida pela Eq. A.1 no Apêndice A.

³No caso de variáveis aleatórias contínuas, $f(\vec{x}) dx_1 dx_2 dx_3 \dots dx_n = \text{Prob}(x_1 \leq X_1 \leq x_1 + dx_1, x_2 \leq X_2 \leq x_2 + dx_2, x_3 \leq X_3 \leq x_3 + dx_3, \dots, x_n \leq X_n \leq x_n + dx_n)$.

como sendo a probabilidade de ocorrer o evento $x \leq X \leq x + dx$ dado que ocorreu o evento $y \leq Y \leq y + dy$. Essa probabilidade pode ser calculada pela expressão:

$$\begin{aligned} \text{Prob}(x|y) &= \frac{\text{Prob}(x \leq X \leq x + dx | y \leq Y \leq y + dy)}{\text{Prob}(x \leq X \leq x + dx, y \leq Y \leq y + dy)} \\ &= \frac{\text{Prob}(x \leq X \leq x + dx, y \leq Y \leq y + dy)}{\text{Prob}(y \leq Y \leq y + dy)}. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Mas, a probabilidade conjunta é escrita como:

$$\begin{aligned} \text{Prob}(x \leq X \leq x + dx, y \leq Y \leq y + dy) &= f(x, y) dx dy, \text{ e} \\ \text{Prob}(y \leq Y \leq y + dy) &= h(y) dy, \end{aligned}$$

então:

$$\text{Prob}(x|y) = \frac{f(x, y) dx dy}{h(y) dy}. \quad (\text{B.16})$$

Se as variáveis forem independentes, a probabilidade condicional $\text{Prob}(x|y)$ é:

$$\text{Prob}(x|y) = \frac{g(x)h(y) dx dy}{h(y) dy} = g(x) dx. \quad (\text{B.17})$$

B.6 Distribuição do Produto e da Soma de Variáveis Aleatórias

Sejam X e Y duas variáveis aleatórias contínuas com função de distribuição conjunta $f(x, y)$ e Z uma terceira variável aleatória tal que $Z = XY$. A probabilidade de ocorrência de Z é:

$$\text{Prob}(z \leq Z \leq z + dz) = f(x, y) dx dy. \quad (\text{B.18})$$

Se X e Y forem independentes, temos:

$$w(z) dz = \text{Prob}(z \leq Z \leq z + dz) = f(x, y) dx dy = g(x) dx \cdot h(y) dy. \quad (\text{B.19})$$

É interessante notar que, neste caso, $E(Z) = E(XY) = E(X) \cdot E(Y)$.

Consideremos agora a variável $Z = X + Y$. Para determinar a função distribuição de Z , $w(z)$, vamos considerar a função característica de $w(z)$:⁴

$$\tilde{w}(k) = \langle e^{ikz} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{ik(x+y)} f(x, y). \quad (\text{B.20})$$

⁴É possível mostrar que, independentemente da distribuição de $w(z)$, $E(Z) = E(X) + E(Y)$.

Mas, se X e Y forem variáveis independentes, $f(x, y) = g(x)h(y)$. Assim, a equação B.20 assume a forma:

$$\tilde{w}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} g(x) \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{iky} h(y) = \tilde{g}(k) \tilde{h}(k), \quad (\text{B.21})$$

que mostra que a função característica da distribuição da soma de duas variáveis aleatórias independentes é o produto das funções características das distribuições dessas variáveis. Assim, de acordo com a equação B.12, a distribuição de Z é:

$$w(z) = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tilde{w}(k) \right\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikz} \tilde{g}(k) \tilde{h}(k). \quad (\text{B.22})$$

O desenvolvimento da equação B.22 depende das características das funções de distribuição de X e de Y .

B.7 Teorema do Limite Central de Gauss

Sejam $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$ variáveis aleatórias contínuas e independentes com funções densidade de probabilidade $f_1(x), f_2(x), f_3(x), \dots, f_n(x)$, respectivamente. Consideremos ainda que essas funções apresentem o segundo momento definido, isto é, $E(X_i^2) < \infty$.⁵ A distribuição da variável aleatória Z dada por $Z = \sum_{i=1}^n X_i$, quando $n \gg 1$, tende a uma distribuição normal, cuja média é dada pela soma das médias das distribuições de $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$, e cuja variância é a soma das variâncias das distribuições de $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$ [16]. Isto é:

$$Z = \sum_{i=1}^n X_i \xrightarrow{E(X_i^2) < \infty} w(z) = \frac{1}{\hat{\sigma} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{z - \hat{\mu}}{\hat{\sigma}} \right)^2}, \quad (\text{B.23})$$

onde

$$\hat{\mu} = \sum_{i=1}^n \mu_i \quad e \quad \hat{\sigma}^2 = \sum_{i=1}^n \sigma_i^2. \quad (\text{B.24})$$

Uma demonstração do teorema do limite central pode ser encontrada nas referências [16, 52].

⁵Ou seja, os valores de X_i dentro de um intervalo longe da média ocorrem com probabilidade muito baixa. Isso não é verdade se a função densidade de probabilidade tiver um decaimento lento, comparado com x^{-2} .

B.8 Teorema do Limite Central de Lévy-Gnedenko

Nesta seção apresentamos a generalização do Teorema do Limite Central de Gauss, desenvolvida por Boris V. Gnedenko e Andrey N. Kolmogorov, para distribuições que não admitam algum momento finito. Inicialmente apresentamos uma descrição das distribuição estáveis e em seguida o teorema do limite central generalizado.

B.8.1 Distribuição Estável

Consideremos duas variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (i.i.d.) X_1 e X_2 . A variável aleatória X é dita *estável* se, para quaisquer a e b positivos, existem $c > 0$ e $d \in \mathbb{R}$ tal que [26]⁶:

$$aX_1 + bX_2 \stackrel{d}{=} cX + d. \quad (\text{B.25})$$

Se $d = 0$, a variável aleatória X é dita *estritamente estável*. O termo *estável* indica estabilidade na distribuição, ou seja, a “forma” da distribuição não se altera.

B.8.2 Teorema do Limite Central Generalizado

Sejam $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$ variáveis aleatórias i.i.d. e Z a variável aleatória definida por $Z = \sum_{i=1}^n X_i$. Nestas condições, Z tende a uma distribuição estável à medida que n aumenta [26].

Em particular, se as distribuições de X_i apresentarem caudas do tipo lei de potência com decaimento proporcional a $|x|^{-(\alpha+1)}$ (e portanto com variância infinita), Z tenderá a seguir uma distribuição α -estável de Lévy⁷ com parâmetros $\beta = 0$ e $\mu = 0$: $f(x; \alpha, 0, c, 0)$.

Uma demonstração do teorema do limite central generalizado pode ser encontrada na referência [53].

⁶O sinal $\stackrel{d}{=}$ indica igualdade na distribuição, isto é ambos os lados têm a mesma distribuição de probabilidades.

⁷As distribuições α -estáveis de Lévy são definidas no Capítulo 2.

APÊNDICE C – Estimativa de Parâmetros pelos Métodos de Máxima Verossimilhança e Mínimos Quadrados

Neste Apêndice os métodos de máxima verossimilhança e de mínimos quadrados são apresentados. O primeiro método foi utilizado para estimar os parâmetros das distribuições q -gaussianas no capítulo 5 desta Dissertação.

C.1 Introdução

Um dos principais problemas encontrados na análise de dados experimentais consiste em ajustar os dados obtidos a modelos teóricos. Destacam-se aqui os métodos de mínimos quadrados, devido à sua larga utilização, e o de máxima verossimilhança.

Consideremos um experimento que forneça, para cada realização, um conjunto de dados formado por uma variável dependente (y), outra independente (x) e um modelo teórico que relacione essas variáveis por meio de uma função f dependente de um vetor de parâmetros $\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$, ou seja:

$$y = f(x : \vec{\theta}).$$

O ajuste dos dados experimentais ao modelo teórico consiste em estimar o valor dos parâmetros θ_i ($i = 1, 2, \dots, m$) de modo que a função f se aproxime o máximo possível dos dados experimentais.

O primeiro método desenvolvido para essa finalidade foi o método dos mínimos quadrados, proposto por Adrien Marie Legendre em 1805, em sua obra “Nouvelle Méthodes pour la détermination des orbites des Comètes”. Imediatamente Gauss reclamou a primazia da descoberta, alegando que já empregava o método desde 1794. O assunto foi objeto

de forte discussão entre ambos, envolvendo correspondências entre os principais nomes da ciência europeia da época [54]. De qualquer forma, foi a denominação de Legendre que sobreviveu: *méthode des moindres carrés*. O método dos mínimos quadrados consiste em determinar qual é o valor $\hat{\theta}$ (chamado de estimador) que minimiza a soma dos quadrados das diferenças entre os dados experimentais e o modelo teórico. Este método se adapta muito bem a modelos lineares.

Em 1890, Chebyshev apresentou outro método para estimativa de parâmetros no âmbito específico de um modelo de distribuição de probabilidades: o *método dos momentos*. Seu trabalho foi posteriormente ampliado por Markov, entretanto, foi somente nas primeiras décadas do século XX que o método foi amplamente difundido por Karl Pearson [54]. Este método consiste em estimar os parâmetros de uma distribuição considerando que todos seus momentos são iguais aos momentos da amostra que se deseja ajustar ao modelo¹.

O método dos momentos é consistente², mas Ronald Aylmer Fisher mostrou que ele era muito ineficiente³. Esta foi uma dentre as várias batalhas travadas entre ambos, até a morte de Pearson, em 1936 [54]. Em 1912, quando ainda era um aluno do terceiro ano do curso de graduação, Fisher apresentou a primeira versão do método de máxima verossimilhança (*maximum likelihood*). Entretanto, o desenvolvimento completo do método somente apareceu nos artigos publicados entre 1922 e 1925 [56]. Apesar de bastante antigo, foi somente a partir da década de 1980 que este método passou a ser extensivamente utilizado, principalmente em econometria [57], em função do desenvolvimento dos computadores pessoais de grande capacidade. A grande importância deste método se deve às boas propriedades assintóticas dos estimadores, que são consistentes e assintoticamente eficientes.

¹Para uma descrição mais detalhada do método dos momentos, ver a referência [55].

²Um estimador $\hat{\theta}$ do parâmetro θ é dito consistente se $\hat{\theta}$ converge *em probabilidade* para θ :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Prob}(|\hat{\theta} - \theta| \geq \epsilon) = 0 \quad \forall \epsilon > 0,$$

onde n é o tamanho da amostra.

³Um estimador $\hat{\theta}_1$ é dito mais eficiente em estimar o parâmetro θ do que outro estimador $\hat{\theta}_2$ se:

- i. $\hat{\theta}_1$ e $\hat{\theta}_2$ forem ambos estimadores sem tendência de θ ;
- ii. $\text{Var}(\hat{\theta}_1) \leq \text{Var}(\hat{\theta}_2)$ para todo θ ;
- iii. $\text{Var}(\hat{\theta}_1) < \text{Var}(\hat{\theta}_2)$ para algum θ .

C.2 O Método de Máxima Verossimilhança

Considere uma amostra aleatória $\vec{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ retirada de uma população com função densidade de probabilidade (pdf) conhecida $f(x : \vec{\theta})$, que depende de um vetor de parâmetros $\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$. Considerando que as variáveis aleatórias x_i sejam independentes, a pdf conjunta da amostra é:

$$F(\vec{X} : \vec{\theta}) = \prod_{i=1}^n f(x_i : \vec{\theta}). \quad (\text{C.1})$$

Antes da retirada da amostra, cada observação faz parte da população e, portanto, tem a mesma pdf dela. Note que os parâmetros da pdf são fixos, não dependendo da amostra a ser retirada. Entretanto, uma vez retirada uma amostra específica da população, os valores x_i que fazem parte da amostra podem ser considerados fixos e a pdf conjunta pode ser reinterpretada como uma função do vetor de parâmetros $\vec{\theta}$. Esta função, onde os parâmetros da distribuição fazem o papel de variáveis, é chamada de *função verossimilhança*:

$$\mathcal{L}(\vec{\theta} : \vec{X}) = \prod_{i=1}^m f(\theta_i : \vec{X}). \quad (\text{C.2})$$

Note que na Eq. C.1, $\vec{X}$ é variável e $\vec{\theta}$ é o vetor de parâmetros (fixo), enquanto que na Eq. C.2 ocorre o contrário: $\vec{\theta}$ é variável e $\vec{X}$ é fixo.

Nos problemas experimentais, a amostra é conhecida, mas não a população, de modo que os parâmetros também são desconhecidos. O problema então consiste em estimar esses parâmetros a partir da amostra. Uma forma de resolver o problema é determinar o vetor estimador $\hat{\vec{\theta}}$ que maximiza a função verossimilhança, ou seja, determinar qual é o vetor que faz com que a probabilidade de obter a amostra já observada seja máxima [58].

Resolver este problema é matematicamente simples, basta igualar a derivada da função verossimilhança em relação ao vetor de parâmetros a zero e resolver o sistema de equações resultantes. Entretanto, devido ao produtório na Eq. C.2, é mais conveniente trabalhar com o logaritmo natural da função verossimilhança:

$$\Lambda(\vec{\theta} : \vec{X}) = \ln \mathcal{L}(\vec{\theta} : \vec{X}). \quad (\text{C.3})$$

Como a função logarítmica é monótona crescente, maximizar $\Lambda(\vec{\theta} : \vec{X})$ equivale a maximizar a função verossimilhança⁴.

⁴Por vezes, pode ser interessante definir $\Lambda(\vec{\theta} : \vec{X}) = -\ln \mathcal{L}(\vec{\theta} : \vec{X})$. Neste caso, maximizar a função

A partir da função $\Lambda(\vec{\theta} : \vec{X})$, podemos definir o escore eficiente, como sendo:

$$S(\vec{\theta}) = \frac{\partial \Lambda}{\partial \vec{\theta}}. \quad (\text{C.4})$$

É fácil perceber que o estimador de máxima verossimilhança ($\hat{\vec{\theta}}$) é aquele para o qual $S(\hat{\vec{\theta}}) = 0$.

Pode-se também definir a matriz de informação I , em que cada elemento é o valor esperado para a segunda derivada de $\Lambda(\vec{\theta} : \vec{X})$ em relação ao vetor de parâmetros no ponto $\hat{\vec{\theta}}$, ou seja, $I_{ij} = E[-\partial^2 \Lambda / \partial \theta_i \partial \theta_j | \hat{\vec{\theta}}]$. A matriz de informação então é escrita como:

$$I = \begin{pmatrix} E \left[-\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta_1^2} \right]_{\hat{\vec{\theta}}} & E \left[-\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta_1 \partial \theta_2} \right]_{\hat{\vec{\theta}}} & \cdots & E \left[-\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta_1 \partial \theta_m} \right]_{\hat{\vec{\theta}}} \\ E \left[-\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta_2 \partial \theta_1} \right]_{\hat{\vec{\theta}}} & E \left[-\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta_2^2} \right]_{\hat{\vec{\theta}}} & \cdots & E \left[-\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta_2 \partial \theta_m} \right]_{\hat{\vec{\theta}}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ E \left[-\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta_m \partial \theta_1} \right]_{\hat{\vec{\theta}}} & E \left[-\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta_m \partial \theta_2} \right]_{\hat{\vec{\theta}}} & \cdots & E \left[-\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial \theta_m^2} \right]_{\hat{\vec{\theta}}} \end{pmatrix}.$$

Dadas algumas condições gerais, é possível mostrar que $\hat{\vec{\theta}}$ é consistente e assintoticamente normalmente distribuído, com variância $\text{Var}(\hat{\vec{\theta}}) \geq I^{-1}$. Este valor é conhecido como limite inferior de Cramer-Rao, pois não existe outro estimador consistente de $\vec{\theta}$ que tenha variância menor [58].

C.3 Aplicação do Método de Máxima Verossimilhança a Uma Distribuição Exponencial

Como exemplo de aplicação do método de máxima verossimilhança para uma distribuição com apenas um parâmetro, consideremos que a amostra $\vec{X}$ foi retirada de uma população com distribuição exponencial com média ℓ , ou seja:

$$f(x : \ell) = \frac{e^{-x/\ell}}{\ell}.$$

A função verossimilhança é, então:

$$\mathcal{L}(\ell : \vec{X}) = \prod_{i=1}^n \frac{e^{-x_i/\ell}}{\ell} = \frac{1}{\ell^n} \prod_{i=1}^n e^{-x_i/\ell},$$

verossimilhança $\mathcal{L}(\vec{\theta} : \vec{X})$ corresponde a minimizar $\Lambda(\vec{\theta} : \vec{X})$.

e seu logaritmo:

$$\Lambda(\ell : \vec{X}) = -n \ln \ell - \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\ell} = -n \ln \ell - \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (\text{C.5})$$

Derivando a Eq. C.5 com relação a ℓ e igualando-a a zero, temos:

$$\frac{d\Lambda}{d\ell} = 0 \Rightarrow -\frac{n}{\ell} + \frac{1}{\ell^2} \sum_{i=1}^n x_i = 0, \quad (\text{C.6})$$

Resolvendo a equação C.6, obtemos o estimador $\hat{\ell}$:

$$\hat{\ell} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = \bar{x},$$

As variância do estimador pode ser obtida a partir da matriz de informação, que, neste caso, apresenta um único elemento:

$$I = (n/\hat{\ell}^2),$$

resultando $\text{Var}(\hat{\ell}) = \hat{\ell}^2/n$.

C.4 Aplicação do Método de Máxima Verossimilhança a Uma Distribuição Gaussiana

Como exemplo de aplicação do método de máxima verossimilhança para uma distribuição com dois parâmetros, consideremos que a amostra $\vec{X}$ foi retirada de uma população com distribuição gaussiana com média μ e variância σ^2 , ou seja:

$$f(x : \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}.$$

A função verossimilhança é, então:

$$\mathcal{L}(\mu, \sigma^2 : \vec{X}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x_i-\mu)^2/2\sigma^2} = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{n/2} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 \right],$$

e seu logaritmo:

$$\Lambda(\mu, \sigma^2 : \vec{X}) = -\frac{n}{2} \ln 2\pi - \frac{n}{2} \ln \sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2. \quad (\text{C.7})$$

Derivando a Eq. C.7 com relação a seus parâmetros e igualando-os a zero, temos:

$$\begin{cases} \frac{\partial \Lambda}{\partial \mu} = 0 \\ \frac{\partial \Lambda}{\partial \sigma^2} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n x_i - \frac{n}{\sigma^2} \mu = 0, \\ -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2(\sigma^2)^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 = 0. \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

Resolvendo o sistema de equações C.8, obtemos os estimadores $\hat{\mu}$ e $\hat{\sigma}^2$:

$$\begin{aligned} \hat{\mu} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = \bar{x}, \\ \hat{\sigma}^2 &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2. \end{aligned}$$

Finalmente, as variâncias dos estimadores podem ser obtidas a partir da matriz de informação:

$$I = \begin{pmatrix} n/\hat{\sigma}^2 & 0 \\ 0 & n/2\hat{\sigma}^4 \end{pmatrix},$$

resultando $\text{Var}(\hat{\mu}) = \hat{\sigma}^2/n$ e $\text{Var}(\hat{\sigma}^2) = 2(\hat{\sigma}^2)^2/n$.

Observe que o método de máxima verossimilhança produz um estimador com tendência (viés) para variância. Isto pode ser corrigido utilizando o estimador:

$$s^2 = \frac{n}{n-1} \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2.$$

C.5 Propriedades dos Estimadores de Máxima Verossimilhança

O estimador de máxima verossimilhança $\hat{\theta}$ é assintoticamente consistente, o que significa que, à medida que a amostra aumenta, o estimador tende ao vetor de parâmetros da população. Para amostra finitas, pode haver uma tendência no valor de $\hat{\theta}$, proporcional a $1/n$, como no caso da variância.

Em condições muito gerais, a distribuição de $\hat{\theta}$ é assintoticamente normal, com variância mínima $\text{Var}(\hat{\theta}) = I^{-1}$. Outra característica do estimador é ser invariante por mudança de parâmetro, o que significa que, para uma função $b(\theta)$ o estimador será $\hat{b} = b(\hat{\theta})$.

Por fim, se existir um estimador eficiente para um dado problema, o método de máxima verossimilhança pode encontrá-lo.

C.6 O Método de Mínimos Quadrados

Considere um fenômeno que relaciona duas grandezas x e y por meio da função $y = f(x : \vec{\theta})$, que depende de um vetor de parâmetros $\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$. Um experimento realizado para determinar a relação entre essas grandezas fornece como resultado um conjunto de pares ordenados (x_i, y_i) , onde y_i representa o valor da grandeza y observado para cada valor x_i ($i = 1, 2, 3, \dots, n$) da grandeza x .

O método dos mínimos quadrados consiste em determinar o valor dos parâmetros θ_i ($i = 1, 2, 3, \dots, m$) minimizando a soma dos quadrados das diferenças entre os valores observados e esperados de cada elemento observação experimental. Assim, definimos a função S como sendo:

$$S = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i : \vec{\theta})]^2. \quad (\text{C.9})$$

Em seguida, derivamos S em função do vetor de parâmetros e o igualamos a zero, obtendo:

$$\frac{\partial S}{\partial \vec{\theta}} = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \vec{\theta}} \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i : \vec{\theta})]^2 = 0 \quad (\text{C.10})$$

Finalmente, o estimador $\hat{\vec{\theta}}$ é obtido resolvendo o sistema de equações C.10.

Este método é muito eficiente quando f é uma função linear. Neste caso, $y_i = ax_i + b$, onde a e b são os parâmetros. Os valores estimados de a e b são, então:

$$\begin{aligned} a &= \frac{\text{cov}(x, y)}{\sigma_x^2}, \\ b &= \bar{y} - a\bar{x} \end{aligned}$$

onde $\bar{x}$ e $\bar{y}$ indicam os valores médios de x e de y respectivamente, $\text{cov}(x, y)$ indica a covariância entre x e y e σ_x^2 é a variância de x .

O objetivo do método de mínimos quadrados é minimizar os resíduos, enquanto que o do método de máxima verossimilhança é maximizar a probabilidade de obter novamente uma amostra já observada.

Referências

- [1] C. H. Rycroft and M. Z. Bazant, “Introduction to random walks and diffusion.” Random Walks and Diffusion - 2005 Lecture Notes, MIT, February 2005.
- [2] A. Einstein *Annalen der Physik*, vol. 322, pp. 549–560, 1905.
- [3] M. Z. Bazant, “Historical introduction to random walks and diffusion.” Topics in Applied Mathematics - Lecture Notes for Spring 2001, MIT, February 2001.
- [4] D. Boyer, G. Ramos-Fernández, O. Miramontes, J. L. Mateos, G. Cocho, and H. Ramos, “Deterministic walks for animal foraging,” in *Workshop: “Transport and Self-organization in Complex Systems”*, (Porto Alegre), 2004.
- [5] D. Boyer, O. Miramontes, G. Ramos-Fernandez, J. L. Mateos, and G. Cocho, “Modeling the searching behavior of social monkeys,” *Physica A*, vol. 342, pp. 329–335, October 2004.
- [6] D. Boyer and H. Larralde, “Looking for the right thing at the right place: Phase transition in an agent model with heterogeneous spatial resources,” *Complexity*, vol. 10, pp. 52–55, February 2005.
- [7] J. P. Boon, “Random and deterministic walks on lattices,” in *Second Mexican Meeting on Mathematical and Experimental Physics*, (Ciudad del Mexico), September 2004.
- [8] R. V. Solé, B. C. Murtra, S. Valverde, and L. Steels, “Language networks: their structure, function and evolution,” *Trends in Cognitive Sciences*, 2005.
- [9] O. Kinouchi, A. S. Martinez, G. F. Lima, G. M. Lourenço, and S. Risau-Gusman, “Deterministic walks in random networks: an application to thesaurus graphs,” *Physica A*, vol. 315, pp. 665–676, December 2002.
- [10] G. F. Lima, A. S. Martinez, and O. Kinouchi, “Deterministic walks in random media,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 87, p. 010603, June 2001.
- [11] H. E. Stanley and S. V. Buldyrev, “Statistical physics: The salesman and the tourist,” *Nature*, vol. 413, pp. 373–374, 2001.
- [12] A. Fick *Annalen der Physik*, vol. 170, pp. 59–86, 1855.
- [13] K. Pearson *Nature*, vol. 72, p. 294, 1905.
- [14] J. Klafter and I. M. Sokolov, “Anomalous diffusion spreads its wings,” *Physics World*, August 2005.
- [15] E. W. Weisstein, “Binomial distribution.” From MathWorld - A Wolfram Web Resource.

- [16] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, vol. 1 and 2. New York: John Wiley and Sons, 1966.
- [17] I. T. Pedron and R. S. Mendes, “Difusão anômala e equações generalizadas de difusão,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 27, pp. 251–258, 2005.
- [18] H. Scher and E. Montroll, “Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids,” *Phys. Rev. B*, vol. 12, pp. 2455–2477, 1975.
- [19] J. G. Berryman and C. J. Holland, “Evolution of a stable profile for a class of nonlinear diffusion equations ii,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 19, pp. 2476–2480, 1978.
- [20] M. F. Shlesinger, J. Klafter, and B. West, “Random walks with applications to turbulence and chaos,” *Physica A*, vol. 104, pp. 212–218, 1986.
- [21] M. F. Shlesinger, B. J. West, and J. Klafter, “Levy dynamics of enhanced diffusion: Application to turbulence,” *Physics Review Letters*, vol. 58, pp. 1100–1103, 1987.
- [22] H. Spohn, “Surface dynamics below the roughening transition,” *J. Phys. I (France)*, vol. 3, pp. 69–81, 1993.
- [23] J. Stephenson, “Some non-linear diffusion equations and fractal diffusion,” *Physica A*, vol. 222, pp. 234–247, 1995.
- [24] C.-K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley, and A. L. Goldberger, “Long-range anticorrelations and non-gaussian behavior of the heartbeat,” *Physics Review Letters*, vol. 70, pp. 1343–1346, 1993.
- [25] C. Anteneodo, “Non-extensive random walks,” *Physica A*, vol. 358, pp. 289–298, 2005.
- [26] J. P. Nolan, “Stable distributions models for heavy tailed data.” <http://academic2.american.edu/~jpnolan/stable/chap1.pdf>, 2005.
- [27] P. J. Clark and F. C. Evans, “On some aspects of spatial pattern in biological populations,” *Science*, vol. 121, pp. 397–398, March 1955.
- [28] P. J. Clark, “Grouping in spatial distributions,” *Science*, vol. 123, pp. 373–374, September 1956.
- [29] M. F. Dacey, “Proportion of reflexive n th-order neighbours in a spatial distribution,” *Geographical Analysis*, vol. 1, pp. 385–388, 1969.
- [30] T. F. Cox, “Reflexive nearest neighbours,” *Biometrics*, vol. 37, pp. 367–369, June 1981.
- [31] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes: The Art of Science Computing*. Cambridge: Cambridge University Press, 1989.
- [32] S. R. de Azevedo Salinas, *Introdução à Física Estatística*. Edusp, 1997.
- [33] S. Risau-Gusman, A. S. Martinez, and O. Kinouchi, “Escaping from cycles through a glass transition,” *Phys. Rev. E*, vol. 68, p. Art. No. 016104 Part 2, July 2003.

- [34] A. S. Martinez, O. Kinouchi, and S. Risau-Gusman, “Exploratory behavior, trap models and glass transitions,” *Phys. Rev. E*, vol. 69, p. Art. No. 017101 Part 2, January 2004.
- [35] O. Kinouchi, *O Beijo de Juliana - Quatro físicos teóricos conversam sobre crianças, ciências da complexidade, biologia, política, religião e futebol...* 2003. <http://comciencias.blogspot.com>.
- [36] A. de Jesus Holanda, I. T. Pizza, O. Kinouchi, A. S. Martinez, and E. E. S. Ruiz, “Basic word statistics for information retrieval: thesaurus as a complex network,” in *1^o Workshop em Tecnologia da Informação e Linguagem Humana* in: *Anais Sibgrapi XVI Brazilian Symposium on Computer Graphics and Image Processing 2003.*, (São Carlos), 12 Outubro 2003.
- [37] G. F. de Lima, *Caminhadas determinísticas em meios desordenados: problema da caminhada do turista*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto - SP, Junho 2002.
- [38] C. A. S. Terçariol and A. S. Martinez, “Analytical results for the statistical distribution related to a memoryless deterministic walk: Dimensionality effect and mean-field models,” *Physical Review E*, vol. 72, pp. 021103–1–021103–8, August 2005.
- [39] M. Mezard and G. Parisi, “Mean-field equations for the matching and the travelling salesman problems,” *Europhys. Lett.*, vol. 2, pp. 913–918, December 1986.
- [40] O. C. M. Allon G. Percus, “The stochastic traveling salesman problem: Finite size scaling and the cavity prediction,” *J. Statist. Phys.*, no. 94, pp. 739–758, 1999.
- [41] H. F. B. Derrida, “The random map model: a disordered model with deterministic dynamics,” *Journal de Physique*, no. 48, pp. 971–978, 1987.
- [42] G. Grimmett, *What is Percolation?* Springer, 1999. Chapter 1 draft at http://www.maoz.com/dmm/complexity_and_the_internet/.
- [43] S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, “Percolation processes I. crystals and mazes,” in *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 53, pp. 629–641, August 1957.
- [44] M. M. de Oliveira and G. A. Braga, “O fenômeno de transição de fase no modelo de percolação de elos* em d dimensões,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 24, pp. 448–454, Dezembro 2002.
- [45] J. Chayes and L. Chayes, *Percolation and Random Media, in Critical phenomena, random systems and gauge theories*. Elsevier Science Publishers B.V., 1986.
- [46] A. E. B.I. Shklovskii, “Percolation theory and conductivity of disordered systems,” *Uspekhi Fiz. Nauk* 117, vol. 401, 1975.
- [47] M. Sahini, *Application of Percolation Theory*. London: Taylor and Francis, 1994.
- [48] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*. London: Taylor and Francis, 1992.

- [49] J. R. Reitz, F. J. Milford, and R. W. Christy, *Fundamentos da Teoria Eletromagnética*. Rio de Janeiro: Campus, 1991.
- [50] M. Abramowitz and I. A. Stegun, eds., *Handbook of Mathematical Functions*. New York: Dover Publications, 1972.
- [51] C. Tsallis, “Entropic nonextensivity: a possible measure of complexity.” (cond-mat/0010150), 2000.
- [52] C. A. Tracy, “Central limit theorem.” available at <http://www.math.ucdavis.edu/tracy/courses/math131/UsefullCourseMaterial/CLT.pdf>, January 2006.
- [53] B. V. Gnedenko and A. N. Kolmogorov, *Limit distributions for sums of independent random variables*. Addison-Wesley, 1954.
- [54] C. H. Franklin, “Maximum likelihood estimation - parametric models and history.” University of Wisconsin lecture notes, available at <http://www.polisci.wisc.edu/franklin/Content/MLE/Lecs/MLELec01p4up.pdf>, June 2005.
- [55] K. S. Trivedi, *Probability and Statistics with Reliability, Queuing and Computer Science Applications*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1982.
- [56] J. Aldrich, “R. A. Fisher and the making of maximum likelihood 1912 - 1922,” *Statistical Science*, vol. 12, no. 3, pp. 162–176, 1997.
- [57] J. S. Cramer, *Econometric Applications of Maximum Likelihood Methods*. Cambridge University Press, 1986.
- [58] M. S. Portugal, “Notas introdutórias sobre o princípio de máxima verossimilhança: Estimação e teste de hipóteses.” disponível em <http://www.ufrgs.br/decon/publionline/textosdidaticos/Textodid04.pdf>, 1995.